

# THESE

présentée

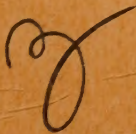
à la Faculté des Sciences de l'Université de Nantes

pour obtenir

le **GRADE de DOCTEUR ès-SCIENCES**

par

**Michel CAILLER**



**CONTRIBUTION A L'ETUDE THEORIQUE DE L'EMISSION ELECTRONIQUE  
SECONDAIRE INDUITE PAR BOMBARDEMENT ELECTRONIQUE**

**Soutenue le 1er juillet 1969 devant la Commission d'Examen**

Melle OFFRET

Président

M. NEEL (Membre de l'Institut)

M. FRIEDEL

M. MINN

} Examinateurs



# THESE

présentée

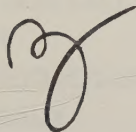
à la Faculté des Sciences de l'Université de Nantes

pour obtenir

le **GRADE de DOCTEUR ès-SCIENCES**

par

**Michel CAILLER**



**CONTRIBUTION A L'ETUDE THEORIQUE DE L'EMISSION ELECTRONIQUE  
SECONDAIRE INDUITE PAR BOMBARDEMENT ELECTRONIQUE**

**Soutenue le 1er juillet 1969 devant la Commission d'Examen**

Melle OFFRET

Président

M. NEEL (Membre de l'Institut)

M. FRIEDEL

M. MINN

} Examineurs



UNIVERSITE DE NANTES

FACULTE DES SCIENCES

---

|                                |                        |                          |
|--------------------------------|------------------------|--------------------------|
| <b>Doyen</b>                   | M. DUNOYER de SEGONZAC | Chimie                   |
| <b>Assesseur</b>               | M. SELLIER             | Zoologie                 |
| <b>Professeurs</b>             | M. PAUC                | Mathématiques            |
|                                | M. RAVILLY (E.N.S.M.)  | Mécanique                |
|                                | M. RAFFIN              | Mécanique rationnelle    |
|                                | M. GARRIGUES           | Biologie végétale        |
|                                | M. BRILLOUET           | Analyse numérique        |
|                                | M. GRAFF               | Chimie                   |
|                                | M. VIVIER (E.N.S.M.)   | Mathématiques appliquées |
|                                | M. COLLET              | Physique                 |
|                                | M. BOULLLOUD (C.S.U.)  | Physique                 |
|                                | Mlle DEBRAUX           | Botanique                |
|                                | M. PETRESCO            | Mathématiques            |
|                                | M. PIERI               | Biologie animale         |
|                                | M. WOJTKOWIAK          | Chimie                   |
|                                | M. AVIGNON             | Physique                 |
|                                | M. MINN                | Physique                 |
|                                | M. MOUTON              | Physique                 |
|                                | M. TARDY (E.N.S.M.)    | Mécanique                |
| <b>Professeurs sans chaire</b> | M. GOBIN (E.N.S.M.)    | Chimie                   |
|                                | M. CAVET               | Sciences de la Terre     |
|                                | M. OTTMANN             | Sciences de la Terre     |
|                                | M. MEZENECV (E.N.S.M.) | Physique                 |
|                                | M. MOLINARO            | Mathématiques            |
|                                | M. DUPONT              | Biologie végétale        |
|                                | M. ROUXEL              | Chimie                   |
|                                | M. QUINIOU             | Chimie                   |
|                                | Mlle OFFRET (E.N.S.M.) | Physique                 |
|                                | M. LASKAR              | Physique                 |
|                                | M. GOUREAUX            | Physique                 |

**Maîtres de Conférences**

M. FORESTIER  
M. SAUDRAY  
M. MARTIN  
M. LE DOUARIN Georges  
M. AMOURIQ  
Mlle ASTIE (C.S.U.)  
M. LAMEAU (E.N.S.M.)  
Mme LE DOUARIN Nicole  
M. TOURNOUX  
M. GUEVEL (E.N.S.M.)  
M. GOUIN (C.S.U.)  
M. POINTEAU (E.N.S.M.)  
M. SULMONT (E.N.S.M.)  
M. BARDON  
M. LONCKE  
M. LEBRUN  
M. JONARD  
M. IBISCH      Maître de Conférences associé  
M. FOUQUES  
M. ROSIER  
M. LEBORGNE  
Mlle LEYCURAS  
M. REMY (C.S.U.)  
M. LE BIHAN  
M. MATZ (C.S.U.)

**Sciences de la Terre**

Biologie animale  
Chimie  
Biologie végétale  
Psychophysiologie  
Botanique  
Mathématiques  
Biologie végétale  
Chimie minérale  
Mathématiques  
Chimie  
Chimie  
Mathématiques  
Physique  
Physique  
Biologie animale  
Biologie végétale  
  
Mathématiques  
Physique  
Mathématiques  
Physique  
Chimie  
Physique  
Biologie

**Secrétaire de la Faculté**

M. PAILLET

**Attaché Principal**

A la mémoire de mes Parents,

A Liliane, Patrice et Laurence

A ma famille



Je tiens à remercier Messieurs les Recteurs M. SCHMITT et Y. PIRONNEAU, anciens Directeurs de l'Ecole Nationale Supérieure de Mécanique, de la confiance et de l'aide qu'ils m'ont apportées au cours de mes premières années de Recherches.

Mes remerciements s'adressent également à Monsieur le Professeur D. TARDY, Directeur de l'E.N.S.M., en particulier pour un stage riche en Enseignement qu'il m'a permis d'effectuer à l'Université de CAMBRIDGE. Je remercie Monsieur le Professeur Sir N.V. MOTT et le Docteur V. HEINE de leur accueil au Cavendish Laboratory.

Monsieur le Professeur L. NEEL, Membre de l'Institut, m'a fait l'honneur de faire partie du Jury de cette Thèse. Je le prie de bien vouloir accepter l'expression de mes remerciements.

Que Monsieur le Professeur J. FRIEDEL trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance pour les critiques et conseils éclairés qu'il n'a cessé de me dispenser et pour sa participation au Jury.

Mes remerciements vont également à Monsieur le Professeur S.S. MINN pour ses encouragements et l'intérêt qu'il a bien voulu porter à mon travail.

Je remercie les membres et amis du Laboratoire de Physique du Métal et du Centre de Calcul, et, plus particulièrement Mme HERVE et Mr D'HERVE pour leur aide amicale dans les calculs numériques.

Enfin, je tiens à dire à Mademoiselle OFFRET, Directeur du Laboratoire de Physique du Métal, qui a dirigé cette étude, combien je lui suis redevable. Je la remercie très respectueusement et très vivement de sa confiance de tous les instants et de sa bienveillante et vigilante direction.



## PLAN

### Chapitre 1. Rappels sur les résultats expérimentaux et leurs interprétations qualitatives

|                                               |    |
|-----------------------------------------------|----|
| 1°/ Définitions                               | 3  |
| 2°/ Classification des électrons.Terminologie | 4  |
| 3°/ Résultats expérimentaux.Interprétations   | 12 |

### Chapitre 2. Théories phénoménologiques de l'EES

|                          |    |
|--------------------------|----|
| 1°/ Première formulation | 36 |
| 2°/ Discussion           | 43 |
| 3°/ Seconde formulation  | 50 |

### Chapitre 3.Généralités sur la théorie quantique de l'émission électronique secondaire

|                                                    |    |
|----------------------------------------------------|----|
| 1°/ Introduction                                   | 58 |
| 2°/ Théorie du transport des électrons secondaires | 61 |
| 3°/ Discussion                                     | 74 |

### Chapitre 4.Théorie microscopique de l'excitation des électrons secondaires

|                                             |     |
|---------------------------------------------|-----|
| 1°/ Excitation par interaction individuelle | 83  |
| 2°/ Excitation par interaction collective   | 100 |

### Chapitre 5.Transitions optiques et transitions électroniques entre-bandes

|                                                                               |     |
|-------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1°/ Transitions optiques et transitions électroniques entre-bandes            | 122 |
| 2°/ Liaison avec la théorie de FROHLICH de l'émission électronique secondaire | 138 |
| 3°/ Résultats                                                                 | 140 |

### Chapitre 6.Conclusion

|           |     |
|-----------|-----|
| Appendice | A.I |
|-----------|-----|



## CHAPITRE I

-:-:-

RAPPELS SUR LES RESULTATS EXPERIMENTAUX ET LEURS

INTERPRETATIONS QUALITATIVES



## CHAPITRE I

RAPPELS SUR LES RESULTATS EXPERIMENTAUX ET LEURS  
INTERPRETATIONS QUALITATIVES.

|     |                                                |    |
|-----|------------------------------------------------|----|
| 1°/ | Définition                                     | 3  |
| 2°/ | Classification des électrons .<br>Terminologie | 4  |
| 3°/ | Résultats expérimentaux                        | 12 |
|     | a) Coefficient de réflexion élastique          | 12 |
|     | b) Coefficient et rendement de l'EES           | 12 |
|     | c) Distribution énergétique des ES             | 31 |
|     | d) Distribution angulaire.                     | 34 |

## Résumé du chapitre I

Après avoir défini les différents termes intervenant dans le phénomène de l'Emission Electronique Secondaire nous avons passé en revue les principaux résultats expérimentaux récents avec lesquels la théorie doit être en concordance. Nous avons mis l'accent sur la possibilité de relier la forme des courbes du rendement en fonction de l'énergie primaire, d'une part à la portée des Electrons primaires, d'autre part à la profondeur de libération des Electrons secondaires. Nous avons montré que cette interprétation est compatible avec l'influence de l'angle d'incidence sur les coefficients de l'EES et sur la position du maximum de ces coefficients. Nous donnons aussi un complément de justification de l'interprétation de la structure fine apparaissant par variation de l'angle d'incidence sur un monocristal telle qu'elle est donnée par PALMBERG.

## 1°/ Définition

Ce sont AUSTIN et STARK [ 1 ] qui, en étudiant la réflexion des rayons cathodiques, ont découvert en 1902 le phénomène d'Émission électronique secondaire ( EES ). Alors que la réflexion complète permet d'espérer au mieux l'égalité entre le nombre des électrons réfléchis et le nombre des électrons incidents, ils ont observé que certaines cibles sont capables de restituer plus d'électrons qu'elles n'en reçoivent. C'est la preuve qu'au moins une fraction de ces électrons prend naissance à l'intérieur même de la substance soumise à l'action du bombardement électronique.

Il existe plusieurs bibliographies sur ce sujet [ 2 - 7 ], c'est pourquoi nous rappellerons et discuterons seulement les principaux résultats expérimentaux récents.

## 2°/ Classification des électrons.Terminologie.

Le faisceau incident est dit faisceau primaire.Il est constitué des électrons primaires ( EP ).

Une distinction,à priori arbitraire,mais trouvant sa justification dans le spectre énergétique des électrons émis (fig. I ) peut être faite parmi les électrons qui s'éloignent de la cible:

- Le pic I correspond aux électrons d'énergie égale à celle des EP ,disons à -5 eV près, c'est-à-dire qu'il correspond aux électrons primaires réfléchis élastiquement ( EPR ).Cette réflexion résulte,soit d'un effet de barrière de potentiel sensible à l'existence de défauts superficiels et de domaines,soit d'une diffraction de BRAGG,elle concerne alors,les quelques premières couches atomiques.

- La partie III correspond au pic des électrons secondaires (ES),expérimentalement sa limite supérieure est fixée arbitrairement à 50 eV.

- Le domaine intermédiaire II est celui des électrons primaires rétrodiffusés ou réfléchis inélastiquement ( ERI ). Il est admis que ces électrons prennent leur source dans le faisceau primaire en raison des interactions des EP avec les noyaux atomiques d'une part, avec les électrons du solide d'autre part. On notera en particulier la présence de petits pics signalés sur la figure I par une flèche et résultant de l'émission des EP qui ont subi des pertes discrètes dans le solide, par exemple en y ayant excité des plasmons.

Expérimentalement on sépare les contributions à l'EES des EP qui s'enfoncent dans le métal ou électrons diffusants ( ED ) et des ERI.

$n_I$  étant le nombre d'électrons qui, par unité de temps, viennent frapper le solide et  $n'_I$ ,  $n'_2$ ,  $n_2$  étant les nombres d'EPR d'ERI et d'ES quittant la cible pendant le même temps, on définit les paramètres suivants:

$$\text{coefficient d'EES} \quad \sigma = \frac{n_2 + n'_2}{n_I - n'_I} \quad (1)$$

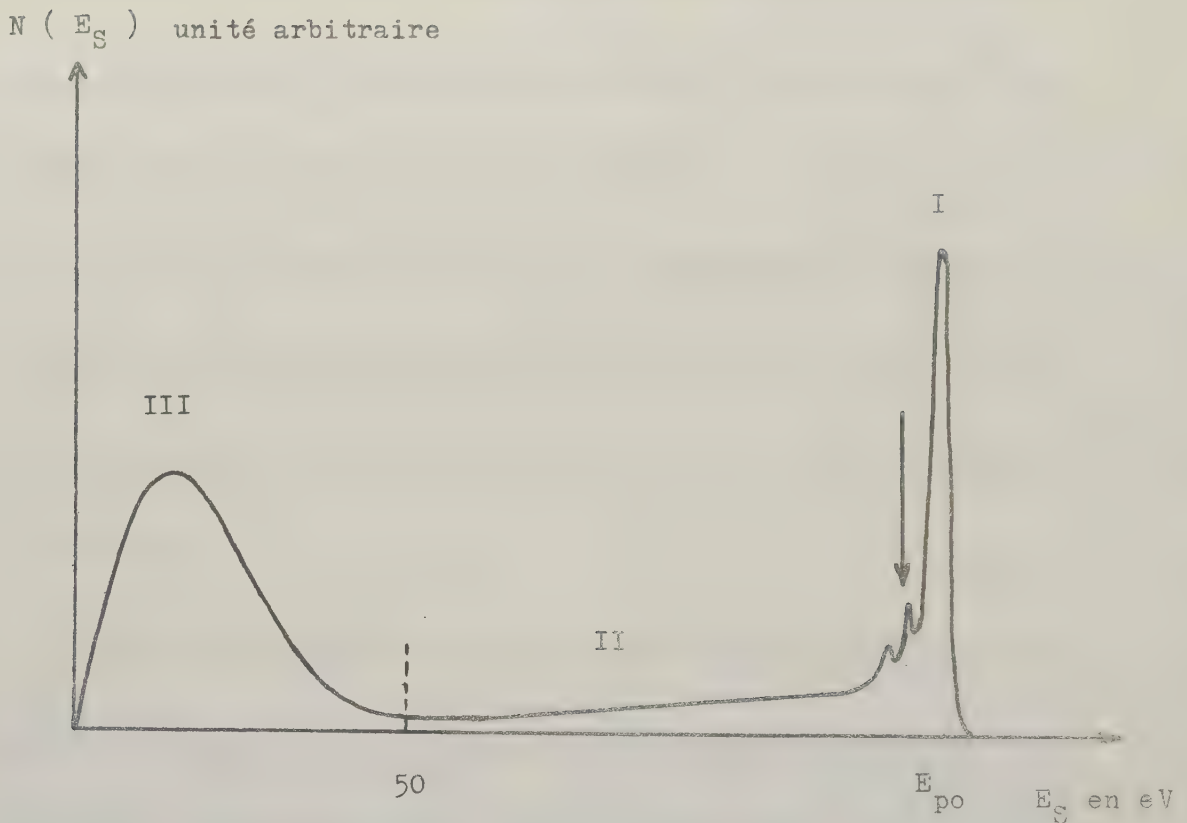


Fig. I : Distribution énergétique des ES

pic I : Electrons primaires réfléchis élastiquement

II: Electrons primaires rétrodiffusés inélastiquement

III: Electrons secondaires.

Les pics signalés par une flèche sont dus aux électrons primaires ayant perdu une quantité d'énergie discrète par excitation d'un plasmon.

$$\text{coefficient de r trodiffusion} \quad \gamma = \frac{n'_2}{n_I - n'_I} \quad (2)$$

$$\text{rendement d'EES} \quad \delta = \frac{n_2}{n_I - n'_I} = \nabla - \gamma \quad (3)$$

Les mesures de ces diff rents param tres s'obtiennent par application d'un potentiel de freinage entre la cible et le collecteur.

La contribution des ERI   l'EES est importante [8 - II] .

NAKHODKIN [I2 - I4] a sugg r  la s paration de la contribution des ERI de celle des ED qui est d finie par:

$$\delta_o = \delta - S\gamma = \nabla - \gamma - S\gamma \quad (4)$$

o  S repr sente l'efficacit  des ERI. Cette relation constitue une lin arisation de l'expression de PALLUEL

$$\delta_o = \delta_{E_{po}} - \gamma \delta_{\theta E_{po}} + \gamma^2 \delta_{\theta^2 E_{po}} \dots \quad (5)$$

o   $\delta_{E_{po}}$ ,  $\delta_{\theta E_{po}}$  sont les valeurs mesur es du rendement pour les

 nergies primaires  $E_{po}$ ,  $\theta E_{po}$  ; ... repr sentant les valeurs

moyennes des  nergies des ED et des flux successifs d'ERI. ( $\theta < 1$ )

DOBRETISOV et MATSKEVICH [15] ont exprimé l'efficacité  $\delta_0$

sous la forme

$$\delta_0 = \frac{\gamma - \gamma}{1 + \beta\gamma} \quad (6)$$

expression identique à (4) si l'on fait:

$$\beta = \frac{S}{\delta_0} \quad (7)$$

rapport des efficacités des ERI et des ED. La valeur de  $\beta$  peut

être évaluée comme étant de l'ordre de  $\pi$  en incidence normale

car, en moyenne, les ERI ont par rapport aux ED

1) une énergie 2 fois plus petite donc un taux de création des ES 2 fois plus grand quand rapporté à l'unité de longueur.

2) une longueur de parcours  $\pi / 2$  fois plus grande.

Des mesures directes du coefficient S ont été réalisées par BRONSHTEJN [16 - 21, 24, 25] et par KANTER [22]. La méthode utilisée par BRONSHTEJN a été discutée par GOMOJUNOVA [26] qui a montré qu'elle donnait une limite inférieure de S. Cependant les résultats expérimentaux sont supérieurs à l'estimation précédente. Une confirmation du rôle important joué par les ERI a été donnée par KANTER

[23] qui a montré que l'EES est proportionnelle à la quantité

d'énergie absorbée par la cible, or cette quantité est, par électron, beaucoup plus grande pour les ERI que pour les ED.

Le principe de la mesure de  $S$  peut être schématisé de la façon suivante ( cf. fig 2 ). On suppose que la profondeur de libération des ES  $\lambda$  est très inférieure à la profondeur de sortie  $d^*$  des ERI .La différence de rendement entre les deux cibles représentées sur la fig. 2 provient des ERI rétrodiffusés au-delà de  $x_I$  dans la seconde cible si les deux inégalités suivantes sont vérifiées:

$$x_1 > \lambda \quad (8)$$

$$d^* > x_1 \quad (9)$$

L'accroissement  $\Delta\delta$  du nombre des ES est lié à l'accroissement  $\Delta\gamma$  du nombre des ERI par:

$$\Delta\delta = S. \Delta\gamma \quad (10)$$

BRONSHTEJN utilise une variante de cette méthode. La cible est réalisée par des dépôts successifs de couches d'un métal 1 sur un support constitué d'un métal 2. Le diagramme  $\delta-\gamma$  révèle

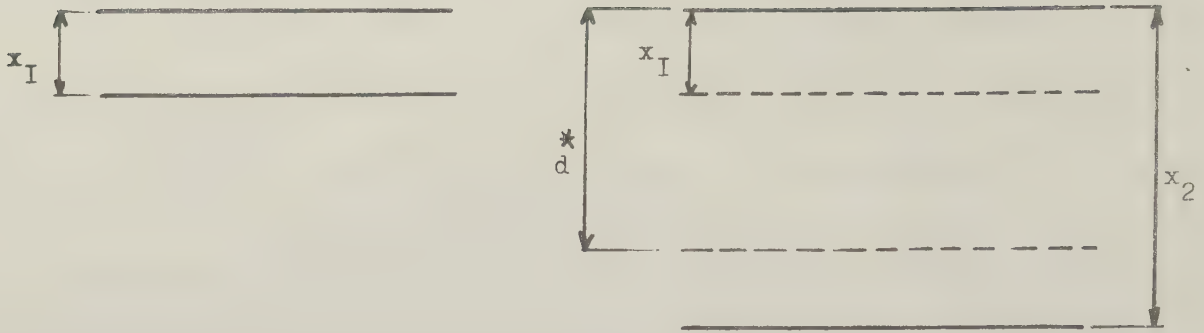


Fig 2 : Cibles utilisées pour la détermination de l'efficacité des électrons primaires rétrodiffusés. Si l'épaisseur de la première cible  $x_I$  est supérieure à la profondeur de libération des ES et inférieure à la profondeur de libération des ERI, la différence entre les rendements des deux cibles est due aux ERI rétrodiffusés au-delà de  $x_I$ .

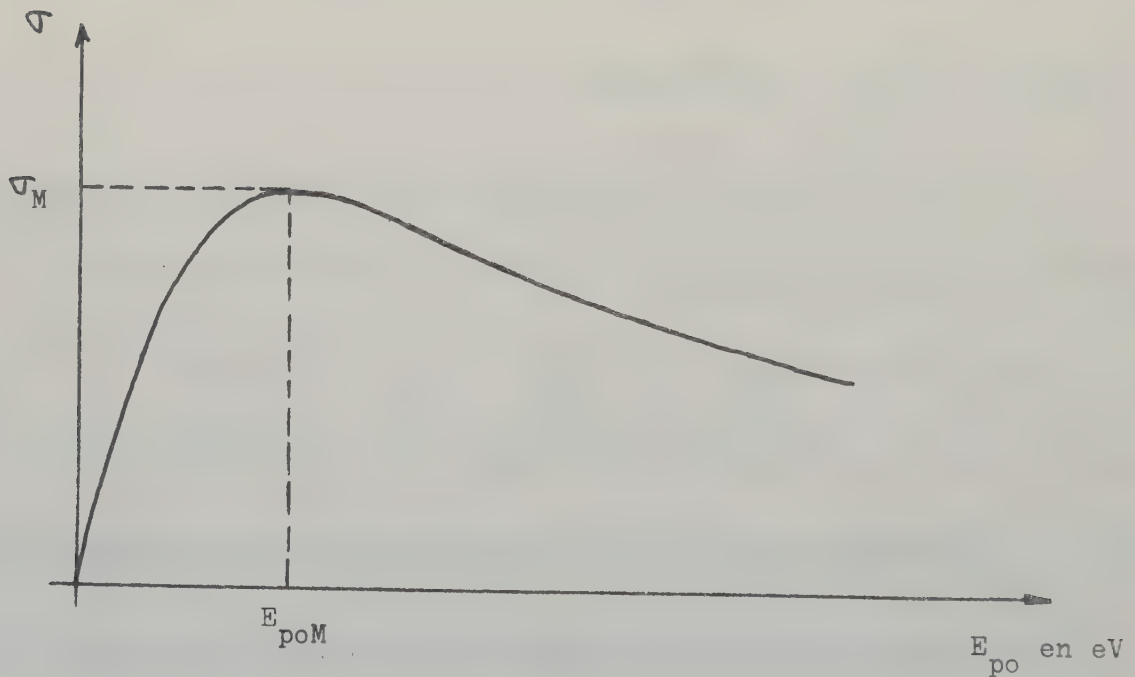


Fig 3 : Courbe représentative des variations du coefficient d'EES en fonction de l'énergie électronique primaire.

l'existence de 2 ensembles de droites pour lesquelles la cassure se produit, quelle que soit l'énergie des EP; pour la même épaisseur de recouvrement. Celle-ci est interprétée comme étant la profondeur de libération des ES dans le métal I. Schématiquement, dans la méthode de BRONSHTEJN, les valeurs globales de  $\eta$  et  $\delta$  s'écrivent:

$$\eta = \eta_1 + \eta_2 \quad (II)$$

$$\delta = \delta_{0,1} + \delta_{0,2} + S_1 \eta_1 + S_1 \eta_2 + S_2 \eta_2 \quad (I2)$$

où les valeurs des paramètres du support tiennent compte du recouvrement. Dans le cas où (8) et (9) sont vérifiées, l'expression (I2) prend la forme simplifiée:

$$\delta = \delta_{0,1} + S_1 \eta_1 + S_1 \eta_2 \quad (I3)$$

Pour une même énergie primaire, en négligeant les variations de  $S_I$ , les relations (II) et (I3) conduisent à:

$$\Delta \eta = \Delta \eta_1 + \Delta \eta_2 \quad (I4)$$

$$\Delta \delta = S_1 \Delta \eta_1 + S_1 \Delta \eta_2 = S_1 \Delta \eta \quad (I5)$$

Ainsi  $S_1$  peut être évalué à l'aide de la pente à grande épaisseur du diagramme  $\delta - \eta$ .

### 3°/ Résultats expérimentaux

#### a) Coefficient de réflexion élastique

La variation du coefficient de réflexion élastique en fonction de l'énergie électronique primaire  $E_{po}$  montre [27 - 37] montre que ce coefficient  $r$  est petit et décroît quand  $E_{po}$  croît au-delà d'une certaine valeur limite de l'ordre d'une dizaine d'eV. Les plus grandes valeurs de  $r$  sont obtenues dans le domaine des faibles énergies primaires. Cependant, même dans ce domaine elles ne dépassent pas 0,05 à 0,1. Ces électrons qui n'ont pas ou peu perdu d'énergie n'ont pu exciter d'ES si ce n'est par un phénomène cumulatif. Celui-ci est supposé négligeable, c'est la raison pour laquelle, expérimentalement, le nombre des EPR est retranché du nombre des EP.

#### b) Coefficient et rendement d'EES

Il existe de très nombreux résultats sur les fonctions  $\sigma(E_{po})$  et  $\delta(E_{po})$  [16, 17, 24, 33, 38-59]. Beaucoup sont dus à BRONSHTEJN et à ses collaborateurs.

De façon générale la courbe  $\sigma(E_{po})$  se présente sous la forme de la figure 3 . Elle possède un maximum  $\sigma_M$  pour  $E_{po} = E_{poM}$  .

La courbe réduite  $\sigma / \sigma_M = f(E_{po} / E_{poM})$  tracée pour tous les éléments simples ne s'éloigne guère d'une courbe moyenne dite "courbe universelle" . Si une telle courbe existe, un élément est complètement caractérisé par ses valeurs de  $\sigma_M$  et  $E_{poM}$  . La courbe

$\delta(E_{po})$  présente une allure similaire à celle de  $\sigma(E_{po})$  et l'on peut se poser la question de la courbe réduite universelle. Ce point sera repris dans le chap.2.

Qualitativement ces courbes peuvent s'expliquer ainsi: Les ES sont excités tout le long du parcours des ED. Pour les faibles  $E_{po}$  le domaine d'excitation des ES est plus petit que leur domaine de libération. Le domaine d'excitation croissant avec l'énergie primaire il en est de même pour le rendement. Si le domaine d'excitation est plus grand que le domaine de libération, c'est cette dernière quantité qui limite effectivement la sortie des ES. Comme la probabilité d'excitation des ES varie en sens inverse de  $E_{po}$  le nombre d'ES excités dans la couche d'épaisseur  $\lambda$  décroît si  $E_{po}$  croît, il en est de même pour  $\delta$  .

Nous avons essayé d'obtenir un certain nombre de preuves quantitatives pour étayer cette explication. Elles concernent:

1) la portée des EP et la profondeur de libération des ES

2) l'influence de l'angle d'incidence, en particulier sur

la valeur de  $E_{poM}$ .

1) Portée des EP. Profondeur de libération des ES.

D'après l'explication des variations de  $\nabla$  donnée plus haut, la profondeur de pénétration des EP doit, pour  $E_{po} = E_{poM}$ , être égale à la profondeur de libération des ES. A l'aide des valeurs obtenues expérimentalement [16 - 18, 20, 60 - 71, 80 - 84] il est possible d'estimer les portées  $R_1$  et  $R_2$  correspondant aux énergies des maxima de  $\nabla$  et  $\delta$ . Ces résultats sont présentés dans le tableau I avec la profondeur de libération des ES telle qu'elle résulte des mesures de BRONSHTEJN [16 - 18, 20, 21, 40, 42, 72]. On note que:

1) l'accord entre les différentes portées est bon si l'on ne conserve que les déterminations faites à suffisamment faible énergie et si l'on multiplie les valeurs obtenues par BRONSHTEJN par un facteur de 1,25 tenant compte du fait que la relation entre la portée

des EP et la profondeur de libération des ERI est [84]

$$R = 2,5 d^* \quad (I6)$$

et non  $R = 2 d^* \quad (I7)$

en raison de la diffusion.

2) Nous n'avons donné pour  $\lambda$  que les valeurs de BRONSH-TEJN, mais il existe un désaccord important entre ses résultats et ceux de MALAT [73 - 74]. Celui-ci a obtenu par une méthode fondamentalement de celle de BRONSHTEJN et pour l'Argent:  $\lambda = 300 \text{ \AA}$ . Ses résultats toutefois demandent une confirmation.

3) Le désaccord est grand entre les portées des EP et les profondeurs de libération des ES, mais les égalités:

$$R_I = \lambda \quad (I8)$$

et  $R_2 = \lambda \quad (I9)$

suresiment le second membre; en effet  $R_I$  et  $R_2$  correspondent à l'épaisseur de la couche que traversent au maximum les EP tandis que l'excitation dans la couche d'épaisseur  $\lambda$  ne doit atteindre effectivement son maximum que si un nombre important d'électrons du faisceau primaire atteint cette profondeur. En d'autres termes

l'égalité ne doit pas avoir lieu pour la portée maximale des EP mais pour leur portée la plus probable. C'est pourquoi de meilleurs résultats sont à espérer de la comparaison des profondeurs de libération des ES avec les épaisseurs des couches minces pour lesquelles les coefficients de transmission sont égaux à  $1/e$ . Ces épaisseurs ont été mesurées par MAKHOV [75] pour 5 éléments et  $Al_2O_3$ . L'accord obtenu est meilleur qu'auparavant. Il reste mauvais pour Al, Si, et Ge. Nous pouvons à ce sujet faire 2 remarques:

- 1) BRONSHTEJN a donné pour Al plusieurs valeurs de  $\lambda$  à savoir 8, 15 et 20 couches atomiques. Les valeurs de  $\lambda$  indiquées dans le tableau I sont les 2 dernières car les plus récentes. L'accord avec la première valeur aurait été bon.
- 2) Les valeurs calculées de  $R_M$  correspondent au maximum de  $\delta$  alors que d'après le principe de l'explication donnée, l'accord doit se réaliser, plus précisément au maximum  $E''_{poM}$  de  $\delta_0$ . Or celui-ci est, par rapport au maximum de  $\delta$ , déplacé vers les grandes énergies pour Al, Si et Ge. L'accord est meilleur (cf. Tableau I) sauf pour Ge, mais pour ce dernier élément le maximum de  $\delta_0$  est très plat et s'étend pratiquement de 400 à 600 eV. De plus les résultats expérimentaux relatifs à cet élément [20, 41, 45, 57] sont très différents.

TABLEAU I

PORTEES DES EP ET PROFONDEURS DE LIBERATION DES ES

| Elément | $E_{poM}$<br>keV | $R_I$<br>Å                          | $E'_{poM}$<br>keV | $R_2$<br>Å                          | $\lambda$<br>Å | $R_M$<br>Å   | $R'_M$<br>Å | Réf.                             |
|---------|------------------|-------------------------------------|-------------------|-------------------------------------|----------------|--------------|-------------|----------------------------------|
| Al      | 0,3              | 85<br>88                            | 0,35              | 106<br>107                          | 43-58          | 24           | 44          | 68<br>69-64                      |
| Si      | 0,3              | 80<br>94<br>82                      | 0,3               | 80<br>94<br>82                      | 35             | 20           | 32          | 65<br>68<br>18                   |
| Cu      | ~0,6             | 90<br>60<br>87                      | ~0,6              | 90<br>60<br>87                      | 36             | 41           |             | 65<br>68<br>20                   |
| Ge      | 0,4<br><br>0,7   | 75<br>71<br>72<br>164<br>155<br>125 | 0,3<br><br>0,6    | 50<br>47<br>48<br>132<br>125<br>102 | 24<br><br>24   | 21<br><br>57 |             | 65<br>68<br>20<br>65<br>68<br>20 |
| Bi      | 0,9              | 15                                  | 0,8               | 14                                  | 22             | 31           |             | 65                               |

les valeurs données dans ce tableau sont entachées d'une assez forte incertitude et ne sont données qu'à titre indicatif.

En l'absence de résultats expérimentaux sur la valeur de la portée telle qu'elle est définie par MAKHOV, il n'est malheureusement pas possible d'étendre le contrôle à d'autres éléments. Celui-ci serait plus aisé pour les isolants pour lesquels les profondeurs de sortie des ES sont nettement plus grandes. Ainsi, par exemple, SCHEMELEV [76] donne pour  $\lambda$  les valeurs  $500 \text{ \AA}$  dans KBr,  $600 \text{ \AA}$  dans KCl et  $1000 \text{ \AA}$  dans NaCl, ce qui semble indiquer que les transitions intrabandes agissent pour limiter fortement le lpm des électrons dans les métaux. (cf aussi [85]). PALMBERG et RHODIN [77] ont mesuré la profondeur de libération des électrons AUGER dans l'Or. Ils ont obtenu  $4 \text{ \AA}$  à  $72 \text{ eV}$  et  $8 \text{ \AA}$  à  $362 \text{ eV}$ . En raison du principe d'exclusion de PAULI il est bien connu que le lpm des électrons, tant qu'il reste limité par les collisions électrons-électrons doit croître quand l'énergie des électrons décroît et doit tendre vers l'infini au niveau de FERMI. Ainsi le lpm des électrons doit passer par un minimum que PALMBERG et RHODIN situent vers  $100 \text{ eV}$  comme dans les gaz. Leur valeur numérique pour  $72 \text{ eV}$  s'accorde assez bien avec les valeurs du lpm que nous avons calculées à l'aide de l'expression de

QUINN [78] corrigée pour tenir compte des transitions entre bandes virtuelles et de celle de RITCHIE et ASHLEY [79]. Ces expressions conduisent à un lpm maximal de 60 à 80 Å dans Ag pour des électrons d'énergie 5 eV au dessus du niveau de FERMI c-à-d pour des électrons d'énergie juste suffisante pour franchir la barrière de potentiel superficielle. Ce lpm tombe à environ 30 Å pour des électrons de 10 eV, énergie la plus probable des ES. Dans le cuivre les lpm correspondants sont respectivement de 90 à 120 Å et de 27 à 37 Å. L'accord n'est réalisé ni avec les valeurs de BRONSHTEJN ni avec les valeurs de MALAT. Il semblerait en quelque sorte que Malat donne une valeur, surestimée en raison du mode de préparation de la cible, de la profondeur maximale de sortie des ES alors que BRONSHTEJN donnerait une profondeur de sortie effective correspondant au lpm des électrons ayant l'énergie secondaire la plus probable. Nos considérations précédentes n'auraient de sens que pour la profondeur de sortie effective, le maximum de  $\delta_0$  soit approximativement celui de  $\delta$  ayant lieu pour l'égalité:

portée la plus probable = profondeur effective de sortie des ES

2) Influence de l'angle d'incidence sur les valeurs des paramètres d'émission.

L' influence de l'angle d'incidence sur les paramètres de l'EES concerne aussi bien les valeurs des coefficients d'émission que la profondeur de libération des ES ou l'énergie à laquelle se produit le maximum de  $\delta$  . Si l'analyse de la section précédente tient, un accroissement de l'angle d'incidence doit se traduire, dans le cas des polycristaux , par un accroissement monotone de  $\delta_0$  et par conséquent de  $\delta$  et  $\nabla$  , ainsi que de l'énergie de leurs maxima.

Si les EP se meuvent:

1) en ligne droite

2) en subissant une perte d'énergie constante par unité de longueur de leur parcours, faible devant  $E_{po}$

et si les ES excités sont

1) en nombre proportionnel à la perte d'énergie

2) distribués isotropiquement

3) et si leur probabilité d'émission ne dépend que de leur profondeur de libération suivant une expression de la forme:

$$w(x) = C \exp(-\alpha x) \quad (20)$$

le rapport  $\chi$  des rendements  $\delta_0$  des EP calcu-  
dences  $\theta_i = 0$  et  $\theta_i$  peut se mettre sous

$$\chi = \frac{I}{\cos \theta_i} \cdot \frac{I - \exp(-\alpha \cdot \lambda_{\theta_i})}{I - \exp(-\alpha \cdot \lambda_0)}$$

expression dans laquelle, nous avons supposé que la libération des ES variait avec l'angle d'incidence. Quoiqu'il en soit, d'après la définition même de la probabilité de libération des ES les quantités  $\exp(-\alpha \lambda_0)$  et  $\exp(-\alpha \lambda_{\theta_i})$  doivent être très petites devant l'unité si bien que

$$\chi \approx \frac{I}{\cos \theta_i}$$

Si la probabilité d'émission dépend de la direction du faisceau incident, ce qui peut se produire, par exemple d'une distribution initiale anisotrope des ES, l'expression de  $\chi$  devient [21]

$$\chi = \frac{\alpha(0)}{\alpha(\theta_i)} \cdot \frac{I}{\cos \theta_i} \cdot \frac{I - \exp[-\alpha(\theta_i) \cdot \lambda_{\theta_i}]}{I - \exp[-\alpha(0) \cdot \lambda_0]} \quad (23)$$

$$\approx \frac{\alpha(0)}{\alpha(\theta_i)} \cdot \frac{I}{\cos \theta_i}$$

Si l'on tient compte du ralentissement du faisceau primaire la variation de  $\chi$  est plus rapide que celle indiquée par les relations ( 22 ) et ( 24 ). Par contre, la diffusion du faisceau primaire masque la variation de  $\chi$  avec l'angle d'incidence. Expérimentalement, BRONSHTEIN et DENISOV ont montré que la dépendance angulaire de  $\chi$  est plus marquée pour les éléments légers que pour Pb . Pour Be et Si , la variation de  $\chi$  avec  $\theta_i$  est plus rapide que celle de  $I / \cos \theta_i$  ce qui montre que la diffusion doit être faible dans ces éléments et que l'anisotropie de la distribution initiale des ES et le ralentissement du faisceau primaire y jouent un rôle plus important, contrairement au cas du Pb où la variation de  $\chi$  est moins rapide que celle de  $I / \cos \theta_i$  .

Un point plus intéressant en ce qui concerne les considérations de la section précédente est la variation de la position du maximum de  $\delta_0$  . Nous admettons que les observations théoriques qui suivent s'appliquent aussi bien à  $\delta$  et  $\nabla$  qu'à  $\delta_0$  , car si le nombre des ERI varie avec  $\theta_i$  [ 87 - 90 ] , leur efficacité et leur profondeur de sortie sont, en pratique, indépendantes de l'angle d'incidence [ 89 - 90 ] . Les résultats expérimentaux qui nous serviront de contrôle portent sur le coefficient d'EES  $\nabla$  .

Si l'on néglige la diffusion, en écrivant que la portée des EP ( pour un coefficient de transmission égal à  $I / e$  ) comptée normalement à la surface de la cible est égale à la profondeur de libération  $\lambda$  si la courbe de  $\delta_0$  passe par son maximum, on obtient:

$$R(E_{poM}) \cdot \cos \theta_i = \lambda_{\theta_i} = a(\theta_i) \cdot \lambda_0 \quad (25)$$

Le coefficient  $a(\theta_i)$  tient compte de la variation, avec  $\theta_i$  de la profondeur de libération des ES. A l'aide de leurs résultats expérimentaux BRONSHTEJN et DENISOV ont conclu à un accroissement de 25 % de  $\lambda$  dans le Beryllium quand  $\theta_i$  croît de 0 à 60°. Le même accroissement n'est que de 10 % dans le Silicium et est nul dans Pb. Ce résultat est compatible avec une hypothèse d'excitation isotrope dans Pb, mais cette explication n'est pas la seule possible. Signalons cependant, les résultats de SHATAS et autres [86] qui ont obtenu dans Al comme dans Ni mais pour une très grande énergie primaire une dépendance en  $\sec \theta_i$  du rendement de l'EES et des valeurs égales de ce même rendement dans les émissions en retour et par transpercement, caractéristiques d'une excitation isotrope.

Avec:

$$R(E_{po}) = C E_{po}^n \quad (26)$$

il vient:

$$E_{\text{poM}} = \left( \frac{\lambda_0}{c} \right)^{I/n} \left[ \frac{a(\theta_i)}{\cos \theta_i} \right]^{I/n} \quad (27)$$

La fonction  $a(\theta_i)$  peut être choisie de la forme:

$$a(\theta_i) = \frac{I}{(\cos \theta_i)^m} \quad (28)$$

où l'exposant  $m$  est choisi de telle sorte que la valeur de  $a(\theta_i)$

ainsi calculée s'accorde avec le résultat expérimental pour  $\theta_i = 60^\circ$

D'après MAKHOV [75] nous connaissons les valeurs de l'exposant  $n$

pour Al et Si :  $n_{\text{Al}} = 1,68$   $n_{\text{Si}} = 1,65$ . Dans l'ignorance

de celui de Be nous admettons qu'il possède une valeur similaire.

D'après BRONSHTEJN et DOLININ [90]  $a(\theta_i) = 1,25$  pour  $\theta_i = 60^\circ$

ce qui conduit à prendre  $m = 1,45$ . Il en résulte que  $E_{\text{poM}}$  varie

comme  $I / (\cos \theta_i)^{1,46}$ . En raison de la diffusion et de la contri-

bution des ERI, la dépendance en  $\cos \theta_i$  du coefficient d'EES doit

être en réalité plus faible. Expérimentalement BRONSHTEJN et DOLININ

[104] ont trouvé pour Be une variation de  $E_{\text{poM}}$  avec  $\theta_i$  plus

rapide que celle de  $I / \cos \theta_i$ .

Par contre dans le Plomb, en prenant pour  $n$  la valeur du Bi cad

1,44 et avec  $m = 0$  le maximum de  $\delta_0$  varie comme  $I / (\cos \theta_i)^{0,7}$  alors que BRONSHTEJN et DOLININ obtiennent une variation en  $(\cos \theta_i)^{-0,5}$  pour  $\theta_i \leq 60^\circ$ . Enfin dans le cas du Si  $n = 1,65$  ;  $m = 0,66$  , la valeur théorique de  $E_{\text{poM}}$  varie comme  $(I / \cos \theta_i)$ . C'est le résultat que l'on obtient expérimentalement pour Al qui est l'un des deux plus proches voisins de Si dans la table de Mendeleiev. Malgré le doute qui existe sur les valeurs de certains des paramètres, la conjonction des résultats déduits dans les deux dernières sections donne un support raisonnable à l'interprétation donnée des maxima dans les graphes des paramètres de l'EES liés au rendement.

Dans le cas des métaux monocristallins , la variation monotone des coefficients de l'EES avec l'angle d'incidence s'accompagne d'une structure fine [57, 93 - 103]. Les positions angulaires des maxima principaux correspondent aux directions pour lesquelles le faisceau primaire est incident le long des directions cristallines de faible indice et pour lesquelles, une légère déviation angulaire correspond à une direction de grand indice. Comme l'ont noté PALMBERG [57] , KOMAR et autres [100] , ABROYAN et TITOV [99] la variation de  $\nabla$  avec l'angle d'incidence est principalement due à la variation du coefficient de rétrodiffusion inélastique. De nombreuses études ont

été faites de ce paramètre, tant théoriques [88,91 - 92, 108 - 115] qu'expérimentales [16-17,20,24,40,46,57,68,87-90,105-107,116-120,134]

L'action des variations de  $\gamma$  peut être directe ou indirecte (par accroissement du nombre des ES excités par les ERI). Nous avons cherché à donner un support quantitatif à l'hypothèse de PALMBERG. Pour cela nous avons évalué, à l'aide des valeurs moyennes de l'efficacité  $S$  telles qu'elles sont données par BRONSHTEIN et FRAJMAN [20], les accroissements  $\Delta\sigma$  du coefficient d'EES totale en fonction de l'énergie primaire. Les résultats correspondants sont donnés sur la fig.4.

Les valeurs de  $\Delta\sigma$  et de  $\Delta\gamma$  résultant d'une rotation de  $10^\circ$  de la cible sont tirées de l'article de PALMBERG. Un tel calcul, trouve sa justification dans la constance de  $S$  lors d'une variation de l'angle d'incidence du faisceau primaire. Cette hypothèse a été vérifiée expérimentalement dans le cas d'une cible polycristalline. Elle s'explique [121] par l'indépendance des distributions énergétiques et angulaires (isotrope) des ERI par rapport à l'angle d'incidence du faisceau primaire. La question de sa validité dans les monocristaux est posée.

Une étude de la distribution angulo-énergétique des électrons rétro-diffusés apporterait des éléments d'information sur ce problème.

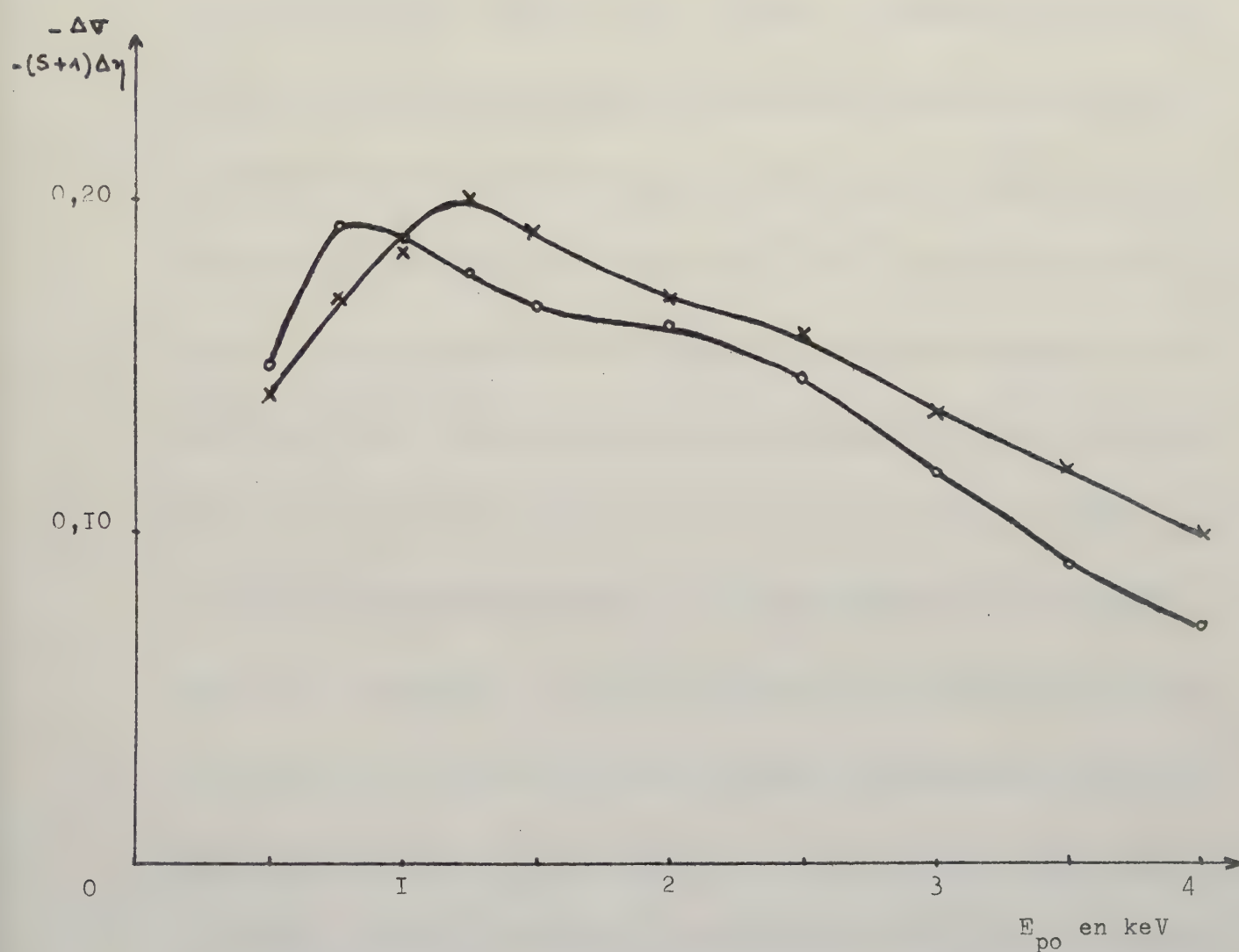


Fig. 4 Variation du coefficient d'EES par rotation de la cible.

Les valeurs de  $\Delta\sigma$  et de  $\Delta\gamma$  sont tirées de l'article de PALMBERG [57].

$$\Delta\sigma = \sigma(\theta_i = 10^\circ) - \sigma(\theta_i = 0)$$

$$\Delta\gamma = \gamma(\theta_i = 10^\circ) - \gamma(\theta_i = 0)$$

En tout état de cause, l'accord obtenu avec la valeur de  $S$  déduite des mesures sur des échantillons polycristallins est raisonnable et justifie l'hypothèse de PALMBERG.

Pour expliquer les variations du coefficient de l'EES avec l'angle d'incidence, STERN et autres [102- 103] ont proposé un modèle dynamique à 2 faisceaux basé sur la variation de l'absorption électronique dans le cristal en fonction des conditions de diffraction. C'est l'extension à l'EES de la théorie de la diffraction électronique formulée par BETHE, HEIDENREICH, HIRSCH et Coll. dont on peut trouver un résumé dans l'article de HASHIMOTO, HOWIE et WHELAN (Proc. Roy. Soc. London 1962, t. A 269, p. 80). Dans le modèle dynamique à 2 faisceaux l'onde incidente est décomposée en 2 champs d'ondes décrits, chacun, par deux vecteurs d'onde  $(k_0^{(1)}, k_G^{(1)})$  et  $(k_0^{(2)}, k_G^{(2)})$ . Les interférences entre  $k_0^{(1)}$  et  $k_G^{(1)}$  conduisent à la formation d'une onde qui se propage parallèlement aux plans atomiques réflecteurs et qui modulée normalement aux plans de réflexion possède ses noeuds sur les sites atomiques si le paramètre représentant la déviation par rapport à la condition exacte de BRAGG est nul. Les interférences entre  $k_0^{(2)}$  et  $k_G^{(2)}$  conduisent à une onde analogue à la précédente mais pour laquelle la fonc-

tion modulatrice possède maintenant ses ventres sur les sites atomiques. Si les conditions de BRAGG ne sont pas réalisées exactement et si les champs d'ondes décrivant les faisceaux électroniques interagissent inélastiquement avec les sites atomiques (par exemple en excitant les électrons localisés sur ces sites) l'onde  $(k_0^{(2)}, k_G^{(2)})$  sera absorbée plus rapidement que l'onde  $(k_0^{(1)}, k_G^{(1)})$  et dans le cas particulier où les conditions de BRAGG sont réalisées exactement la première donnera l'absorption anormale et la seconde la transmission anormale. Si l'amplitude de l'onde (2) est supérieure à l'amplitude de l'onde (1), c'est-à-dire pour une erreur d'excitation négative, il y a accroissement de l'absorption totale dans la couche superficielle. Dans le cas inverse il y a diminution de l'énergie totale absorbée dans la même couche superficielle. L'émission électronique secondaire étant proportionnelle à la quantité d'énergie absorbée, sera plus grande dans le premier cas que dans le second. Selon STERN et autres, seule la diminution de l'EES serait observée en pratique. Or la condition de BRAGG est satisfaite pour la réflexion  $(h, k, l)$  quand le faisceau incident est parallèle à la direction d'observation d'une raie de KIKUCHI, d'autre part cette réflexion n'est grande que si les indices  $(h, k, l)$  sont petits, ainsi l'EES totale sera faible dans les directions correspondant aux lignes

de KIKUCHI déficitaires et aux cercles déficitaires de SHINOHARA, par contre elle sera grande dans les directions correspondant aux régions excédentaires de SHINOHARA et aux bandes de KIKUCHI de faibles indices. Ce résultat se déduit directement du théorème de réciprocité. En liaison avec le travail de PALMBERG, on peut dire que la transmission anormale réduit le coefficient de rétrodiffusion et par là l'EES.

Il est remarquable qu'un phénomène, tout à fait analogue, de dépendance angulaire soit observable dans l'étude de l'EES induite par bombardement ionique (FERT et Coll. [142,143]) .

Des travaux sur la corrélation des variations de l'émission électronique secondaire et des lignes de KIKUCHI ont été réalisés par DUCROS ( cf. par exemple C.R Acad.Sci.Paris 1967,265,p.1040)

### c) Distribution énergétique des ES

La distribution énergétique des ES a été étudiée pour divers éléments [21,45,55-57,116,122-128] .Elle possède un maximum vers quelques eV ( De 2 à 5 eV).C'est une fonction extrêmement sensible de la pureté superficielle,ce qui explique que les mesures anciennes de KOLLATH [129] présentent un maximum indépendant de la nature de la cible,mais caractéristique du dépôt qui s'y est constitué.BRONSHTEJN et SHCHUCHINSKIJ [42,144] ont étudié les variations de la distribution énergétique des ES par dépôt d'un métal alcalin ou alcalino-terreux (ex. Ba) sur un support de nature différente ( ex. W ) ; Il apparait 2 maxima dans la courbe ,l'un caractéristique du Ba ,l'autre du W.Ce dernier disparaît lorsque l'épaisseur du dépôt atteint 10 couches atomiques en accord avec la profondeur de libération des ES dans la Ba . Ces résultats s'accordent avec les déductions théoriques de JASNOPOLSKIJ et TJAGUNOV [145] et de KADYSHEVICH [146] . PALMBERG [57] a montré expérimentalement que la demi-largeur du pic des ES décroît quand le travail de sortie décroît mais que cette variation ne suit pas la relation:

$$N(E_S, W) = N(E_S, 0) \cdot [1 - (W/E_S)] \quad (29)$$

L'explication doit en être cherchée dans le fait que cette expression est déduite de l'interaction classique de la particule et de la barrière de potentiel, mais aussi dans la structure de bandes. BRONSHTEIN et Coll. [21, 123, 141] ont étudié la variation de l'énergie secondaire la plus probable avec l'angle d'incidence et le n° atomique. Dans la quatrième période de Mendeleiev, cette énergie est croissante dans la première demi-période (K - Ni) puis décroissante. Cette variation doit résulter de la participation des électrons d à l'EES.

HÖLZL [124 - 126] a tracé pour le Platine les courbes  $N(E_S, E_{po}) = f(E_{po})$  pour  $E_{po}$  petit.  $N(E_S, E_{po})$  représente le nombre d'ES émis avec une énergie  $E_S$  lorsque l'énergie primaire est  $E_{po}$ . Ces courbes possèdent deux parties ayant des formes très différentes. De 0 à 12 eV les courbes ont une forme parabolique, alors qu'au dessus de cette valeur la variation de  $N$  est linéaire. Enfin pour  $E_{po} \approx 80$  à 100 eV une périodicité apparaît dont la longueur d'onde est d'environ 13 eV pour  $E_S = 1$  eV et décroît quand  $E_S$  croît. Par translation des courbes, il est possible d'amener les parties paraboliques

en coïncidence. La pente des parties rectilignes est une fonction en escalier de  $E_S$ . Deux solutions sont possibles pour expliquer ce phénomène:

- ou la fonction excitation elle-même est une fonction en escalier

- ou la section efficace de diffusion des ES est une fonction non uniforme de l'énergie ( interaction avec le plasma ).

Dans les distributions énergétiques des ES apparaissent des pics plus ou moins estompés. Certains s'expliquent par la structure de bandes, d'autres sont liés aux pics de plasmons, enfin d'autres proviennent des transitions AUGER entre couches internes [119, 130]. Ce sont ces derniers pics qui sont à la base du développement de la technique dite de "Spectroscopie AUGER" qui s'annonce très prometteuse [122, 130 - 133] pour l'étude des phénomènes de surface et pour le dosage des éléments légers en complément de la microsonde de CASTAING.

#### d) Distribution angulaire des ES.

Il n'existe guère de résultats expérimentaux sur la distribution angulaire des ES [135 - 138]. Pour le Nickel polycristallin et pour un domaine d'énergie primaire s'étendant de 20 à 450 eV, cette distribution est pratiquement cosinusoidale. Pour les métaux monocristallins BURNS [139] et APPELT [140] ont montré qu'une structure fine très importante en amplitude et très complète en nombre se superpose à cette distribution monotone. Une explication possible est la suivante:

Le réseau peut participer à la conservation de l'impulsion lors de la collision entre un EP et un électron du réseau conduisant à une transition dite "umklapp". Cet effet sera marqué si le niveau du vide correspond à une énergie située dans la seconde zone de BRILLOUIN, c'est par exemple le cas du cuivre qu'ont étudié BURNS et APPELT, et si le lpm. des ES est comparable à celui des EP afin que ceux-là puissent quitter le métal. La conservation de l'impulsion s'écrit:

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q} + \vec{n} \quad (30)$$

où  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$  sont les vecteurs d'onde de l'électron du réseau res-

pectivement avant et après excitation.  $\hbar \vec{q}$  est la perte d'impulsion de l'EP et  $\vec{n}$  est un vecteur du réseau réciproque, il correspond au transfert d'impulsion vers le réseau. Si l'on peut négliger  $\vec{k}$  et  $\vec{q}$  devant  $\vec{n}$  la relation ( 30 ) prend la forme simplifiée:

$$\vec{k}' \approx \vec{n} \quad ( 31 )$$

Ainsi les ES sont fortement orientés le long des directions principales du réseau réciproque, ce qui explique les pics de structure fine de la distribution angulaire. Très récemment GRACHEV et autres [147] en ont donné une explication différente basée sur la canalisation des ES lors de leur transport vers la surface du solide, par analogie avec la canalisation des particules lourdes chargées positivement et des électrons de grande énergie.

Il est possible à l'aide des mesures de BURNS et APPELT d'obtenir des renseignements sur la structure de bandes de la cible au moyen de la conservation de la composante tangentielle de l'impulsion à la traversée de la surface. Cette méthode s'applique bien aux axes de la zone de BRILLOUIN et permet de tracer les bandes loin du niveau de FERMÍ.



## CHAPITRE 2

-:-

THEORIES PHENOMENOLOGIQUES DE L'EES

## CHAPITRE 2

-:-

## THEORIES PHENOMENOLOGIQUES DE L'EES

-:-

|                               |    |
|-------------------------------|----|
| I) Première formulation ..... | 36 |
| 2) Discussion .....           | 43 |
| 3) Seconde formulation .....  | 50 |

## RÉSUMÉ DU CHAPITRE 2 -

Dans ce chapitre, nous avons dans une première partie et en nous appuyant sur 4 hypothèses simples, donné une expression intégrale du rendement d'EES  $\delta$ . La courbe obtenue en imposant des valeurs numériques aux différents paramètres s'accorde tout à fait bien en coordonnées réduites avec la courbe universelle de BAROODY établie pour le coefficient  $\sigma$ . Nous avons discuté ensuite ces hypothèses et imposant la condition supplémentaire de limitation de la profondeur de sortie  $\lambda$  des ES, nous déduisons 2 nouvelles expressions du rendement secondaire. Une s'applique au domaine des énergies primaires correspondant à des portées primaires inférieures à  $\lambda$ , l'autre se met sous la forme  $\delta \propto \frac{I}{E_{po}^{n-1}}$  où  $n$  est l'exposant de la relation  $R = CE_{po}^n$  reliant la portée à  $E_{po}$ . La courbe est universelle dans le second domaine si tous les matériaux ont la même valeur de  $n$ . Les résultats déduits pour 5 éléments des puissances  $n$  de MAKHOV s'accordent aux résultats expérimentaux. L'existence d'une courbe universelle pour  $\delta$  est mise en doute.

# I- Première formulation :

De nombreux auteurs [3,148 - 155] ont cherché à exprimer analytiquement le coefficient d'EES  $\delta$  en fonction de l'énergie initiale  $E_{po}$  des EP et par là-même d'expliquer la courbe universelle de BAROODY.

Mis à part le travail de Mlle DESQUAND et autres [155] qui s'appuie sur la théorie quantique de VAN DER ZIEL, les hypothèses des divers auteurs portent sur les quatre points suivants :

1°/ Perte d'énergie du faisceau d'électrons primaires lors de sa pénétration dans la cible, tant par le ralentissement du faisceau que par son absorption,

2°/ Echange d'énergie entre les EP et les électrons du réseau,

3°/ Distribution angulaire initiale des ES

4°/ Absorption des ES lors de leur trajet vers la surface.

BAROODY [148] tient compte du ralentissement du faisceau primaire à l'aide de la formule de WHIDDINGTON, mais néglige l'absorption. Il admet de plus que le nombre d'ES produit dans une couche d'épaisseur  $dx$  est proportionnel à la perte d'énergie du faisceau primaire dans celle-ci et que tous ces électrons secondaires sont émis dans la direction du faisceau incident et en sens inverse. Il admet, enfin, que les ES sont absorbés suivant une loi exponentielle.

JONKER [149] a repris les hypothèses de BAROODY à l'exclusion de la distribution angulaire initiale des ES qu'il admet isotrope.

LYE et DEKKER [152] ont, dans un premier calcul, repris les hypothèses de BAROODY à l'exception de la formule de WHIDDINGTON, qu'ils remplacent par une loi de puissance généralisée. Dans un second calcul, ils tiennent compte de l'absorption du faisceau primaire en admettant que la perte de puissance est constante lors de la pénétration.

Dans un calcul développé en 1962 [156] nous avons amélioré quelque peu l'accord entre les résultats théoriques et les résultats expérimentaux représentés par la courbe "universelle" de BAROODY.

Pour cela nous nous sommes basés sur les quatre hypothèses :

I°/ Perte d'énergie constante du faisceau primaire

$$\frac{dE_p}{dx} = - \frac{E_{po}}{x_m} \quad (32)$$

Cette hypothèse s'appuie sur les observations suivantes :

- en raison du freinage des EP, leur efficacité devient de plus en plus grande au fur et à mesure qu'ils pénètrent dans la cible. Si l'efficacité par électron croît, par contre le nombre d'électrons du faisceau décroît par absorption. Ces 2 effets ont tendance à se neutraliser. De plus par rétrodiffusion, un nombre important d'EP se propagent en sens inverse du faisceau primaire avec une efficacité allant croissante au cours de leur remontée.

Il existe aussi des évidences expérimentales que nous passerons en revue un peu plus loin.

Dans l'expression (32)  $x_m$  est la portée totale des électrons primaires, elle est reliée à leur énergie initiale par :

$$x_m = CE_{po}^n \quad (33)$$

2°/ Nous admettons avec tous les auteurs cités, que le nombre d'ES  $dn_x$  produits dans la couche  $dx$  par un électron primaire moyen est proportionnel à la perte d'énergie de cet électron dans cette couche

$$dn_x = -KdE_p = K \frac{E_{po}}{x_m} dx \quad (34)$$

3°/ Nous admettons avec JONKER, en conformité avec certains de ses résultats expérimentaux sur la distribution externe des ES, qu'initialement la distribution angulaire des ES produits dans la couche  $dx$  est isotrope. Cette hypothèse ne s'accorde avec l'approximation des électrons libres, que si la diffusion des électrons est importante. Il en est ainsi pour les ERI. Le nombre des ES émis dans la direction définie par un angle  $\theta$  avec la normale à la cible et quel que soit l'azimut  $\varphi$  s'écrit :

$$dn_\theta = dn_x \frac{1}{2} \sin \theta d\theta \quad (35)$$

4°/ Nous admettons enfin que les ES sont absorbés suivant une loi exponentielle. Dès lors seulement  $dn_s$  d'entre eux sortent :

$$dn_s = dn_\theta \cdot e^{-\frac{\alpha x}{\cos \theta}} \quad (36)$$

Le rendement à la valeur :

$$\delta = \frac{1}{2} K \frac{E_{po}}{x_m} \int_0^{x_m} dx \int_0^{\frac{\pi}{2}} e^{-\frac{\alpha x}{\cos \theta}} \sin \theta d\theta \quad (37)$$

Nous avons évalué cette intégrale en prenant comme valeurs des paramètres :

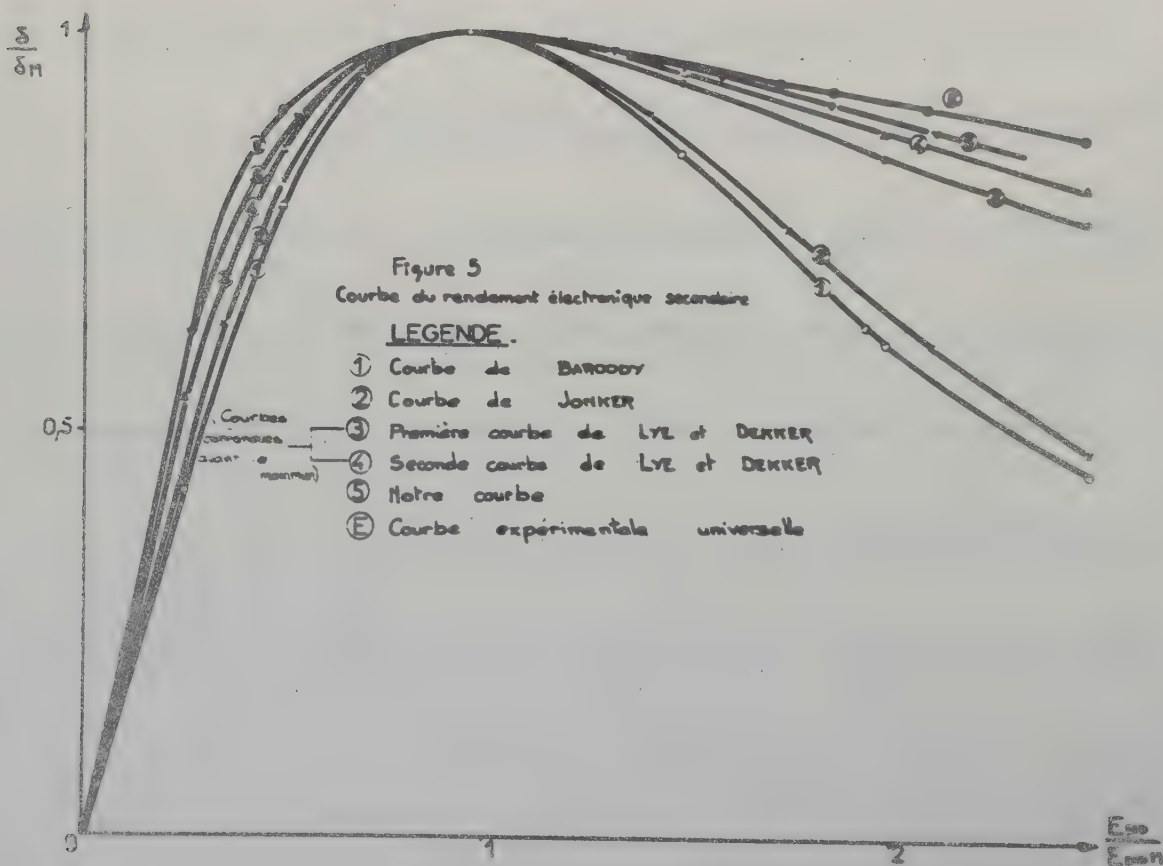
$$\alpha = 1,5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \quad \text{et} \quad x_m = 1,3 \cdot 10^{-10} E_{po}^{1,35} \quad x_m \text{ en cm}$$

et nous avons tracé la courbe représentative en coordonnées réduites

$$\frac{\delta}{\delta_m} \quad \text{et} \quad \frac{E_{po}}{E_{poM}} \quad . \quad \text{Les résultats ainsi obtenus sont en bon accord}$$

avec l'expérience. (Cf. courbes 5 et E de la figure 5).

En raison de cet accord, il est bon de discuter ces différentes hypothèses à la lumière des récents résultats expérimentaux.



## 2 - DISCUSSION

### 1°/ Absorption de l'énergie du faisceau primaire.

Un premier renseignement intéressant concerne la quantité d'énergie dissipée dans la couche d'épaisseur  $dx$  à la profondeur  $x$ . Cette quantité est obtenue, en principe, en faisant la différence entre l'énergie du faisceau primaire et les énergies des faisceaux rétrodiffusés et transmis. Pour évaluer celles-ci il est nécessaire de connaître simultanément le nombre d'électrons contenus dans chacun de ces faisceaux et leur énergie moyenne. Comme il est nécessaire de connaître l'absorption dans chaque couche infinitésimale, il est nécessaire de faire cette étude sur des cibles d'épaisseur variable. Il en résulte une erreur systématique due à l'élimination des ERI provenant des couches plus profondes. C'est la méthode utilisée par KANTER [23].

La méthode qui a servi à VIATSKIN et MAKHOV [157, 158] repose sur la détermination de la variation du coefficient de transmission  $\eta_T$  avec l'épaisseur de la cible. Par différence avec l'unité, on en déduit le nombre des électrons rétrodiffusés

ou absorbés et sa variation. La variation de  $\eta_T$  avec l'épaisseur de la cible suit une relation [159, 162] de la forme :

$$\eta_T(x, E_{po}) = \exp \left[ - \left( \frac{x}{CE_{po}^{\frac{1}{p}}} \right)^p \right] = \exp (-\chi^p) \quad (38)$$

$$= \exp \left[ - A \left( \frac{x}{X} \right)^p \right]$$

où l'on a posé  $\chi = \frac{x}{X}$ ,  $X$  étant la profondeur de pénétration des électrons pour laquelle le faisceau transmis ne contient plus qu'une fraction  $1/e$  du nombre des électrons incidents.

L'expérience [164] conduit à prendre,  $p = 1,9$  pour Al,  $1,7$  pour Cu,  $1,5$  pour Ag,  $1,3$  pour Au et  $1$  pour Pb.

$x^p$  est la valeur moyenne de  $x^p$ .

Les courbes  $f(x) = - \frac{\partial \eta_T(x)}{\partial x}$  donnent [160] le

nombre d'électrons qui ont été soit absorbés soit rétrodiffusés dans la couche d'épaisseur  $dx$  à la profondeur  $x$ .

La fonction  $g(E_{po}, \xi, \chi)$  dans laquelle  $\xi = \frac{E_{px}}{E_{po}}$  et

$\chi = \frac{x}{X}$  représente la distribution des énergies du faisceau

primaire à la profondeur  $x$ . Il est possible d'évaluer cette

fonction [161, 163] et de la mettre sous la forme :

$$g(E_{po}, \xi, \chi) = \frac{N_{po} \cdot p \cdot \chi^p}{E_{po}} \frac{n \xi^{n-1}}{(1 - \xi^n)^{p+1}} \exp \left[ -\left( \frac{\chi}{1 - \xi^n} \right)^p \right] \quad (39)$$

où  $N_{po}$  est le nombre des électrons incidents.

Connaissant la distribution énergétique des électrons transmis on en déduit l'énergie totale transportée par le faisceau et l'énergie moyenne d'un électron à la profondeur  $x$ . Cette énergie moyenne peut s'écrire [I61, I62] sous la forme :

$$\bar{\xi}(\chi) = \frac{\bar{E}_{px}}{E_{po}} = \exp(-A \chi^p) \quad (40)$$

L'énergie absorbée à la profondeur  $x$ , est par unité de longueur :

$$\bar{w}(\chi) = 1 - \eta_T(\chi) \cdot \bar{\xi}(\chi) \quad (41)$$

Pour  $p = 2$  la courbe n'est pas très différente de celle de YOUNG [I65]. L'approximation, consistant à admettre que la variation de l'énergie absorbée est une fonction linéaire de la profondeur de pénétration, n'est pas mauvaise dans le domaine  $(0 < x < \bar{x})$ . Le taux de perte d'énergie  $\frac{dE}{dx}_p$  peut être évalué par la pente de la courbe. Il est d'après MAKHOV, légèrement plus grand qu'indiqué par YOUNG.

RAVIN [I65] a donné de  $\bar{w}(\chi)$  des formules approchées

dans les cas particuliers  $p = 1$ ,  $A = 1$

$$p = 2, A = \pi/4$$

Pour  $p = 1$

$$\bar{w}(\chi) \simeq 1 - e^{-\chi} - \frac{\chi}{k} E_1(-\chi) \quad (42)$$

pour  $p = 2$

$$\bar{w}(\chi) \simeq 1 - e^{-\frac{\pi}{4}\chi^2} + \frac{\pi}{2k} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}\chi\right) \quad (43)$$

avec les notations

$$E_1(-z) = \int_{-\infty}^{-z} \frac{e^y}{y} dy \quad (44)$$

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-y^2} dy \quad (45)$$

Les formules approchées de RAVIN conduisent à des estimations tout

à fait acceptables des formules complètes. Nous pouvons noter encore

que SMIRNOV et RUMSH [I64] ont pu contrôler directement et avec

une concordance acceptable les résultats de MAKHOV.

Pour cela ils calculent les transformées de Fourier du nombre de

quanta  $X$  émis suivant un angle  $\theta_e$  par rapport à la surface et

dans un angle solide  $\Delta\omega$ . Cette transformée donne la distribution

en profondeur des quanta, donc, de l'absorption d'énergie qui peut

être comparée avec l'expression de MAKHOV.

Un contrôle quasi direct a été obtenu expérimentalement par KANICHEVA et BURTSEV [67] en déterminant les taux de variation avec la profondeur et avec le potentiel retardateur arrière du nombre des électrons rapides transmis à travers la cible.

La constance de ces taux entraîne la constance du rapport.

2°/ Sur le deuxième point, on peut faire les remarques suivantes:

Comme indiqué plus haut, la méthode utilisée par KANTER, pour mesurer l'absorption d'énergie dans les cibles minces, ne permet pas d'en déduire celle existant réellement dans les cibles épaisses en raison de la négligence des ERI provenant des couches plus profondes. Cependant la même remarque peut être faite pour les valeurs des coefficients de l'EES. En effet, on néglige de la même façon les contributions des ERI qui, dans la cible épaisse, proviennent de couches situées à des profondeurs supérieures à l'épaisseur de la couche mince utilisée dans les mesures.

C'est pourquoi on peut admettre que le rapport du nombre des ES émis à la perte d'énergie dans la cible, conserve la même valeur que l'on tienne compte ou non de ces ERI, et qu'ainsi la pro-

portionnalité observée entre ces 2 grandeurs reste admissible pour une cible épaisse.

### 3/ Distribution initiale des ES.

Il est bien connu que la distribution initiale calculée des ES est, dans l'approximation des électrons libres, fortement anisotrope si l'on s'en tient au seul processus des excitations individuelles. Cependant, il semble évident que ce processus d'excitation ne doive pas être le seul. Il suffit pour s'en rendre compte de se reporter à la variation observée du rendement de l'EES avec la classification périodique des éléments [19].

Comme BRONSHTEJEN et FRAJMAN l'ont mis en évidence, il y a accroissement à énergie constante de l'EES dans la première moitié des 4ème, 5ème et 6ème périodes, suivi d'une décroissance dans la seconde moitié. Cette variation ne peut s'expliquer que par la participation des électrons d à l'EES et ainsi par la mise en défaut de l'approximation des électrons libres.

De plus, les calculs effectués dans cette même approximation ne s'accordent pas avec les résultats expérimentaux. C'est pour-

quoi nous devons envisager d'autres processus d'excitation, tels que l'amortissement des plasmons par excitation monoélectronique et les transitions entre-bandes. L'anisotropie de la distribution initiale des ES est ainsi remise en cause. De plus, on peut remarquer que la diffusion des ED et des ERI constitue un facteur d'isotropie supplémentaire tendant à effacer assez rapidement toute anisotropie initiale.

Enfin, l'expérience montre que, pour un métal polycristallin, la distribution externe des ES est cosinusoidale, donc que la distribution interne de ces ES est isotrope au voisinage de la surface.

Cette propriété peut être due à la diffusion des ES lors de leur trajet en raison des collisions électro-électron. D'autres arguments sur l'excitation isotrope ont été donnés dans le chapitre I.

4/ L'absorption exponentielle est une description phénoménologique classique de l'absorption, sur laquelle nous n'avons aucune remarque particulière à faire.

### 3) SECONDE FORMULATION

En nous appuyant sur les hypothèses formulées plus haut et en leur adjoignant la condition supplémentaire de constance du parcours des ES quels que soit  $E_{po}$  et l'angle d'émission initial des ES, la formule (37) du rendement peut se réécrire :

$$\delta = \frac{K}{CE_{po}^{n-1}} \int_0^R dx \int_{x/\lambda}^1 e^{\frac{\alpha x}{\cos \theta_e}} d(\cos \theta_e) \quad (46) \text{ si } R < \lambda$$

$$\delta = \frac{K}{CE_{po}^{n-1}} \int_0^\lambda dx \int_{x/\lambda}^1 e^{\frac{\alpha x}{\cos \theta_e}} d(\cos \theta_e) \quad (47) \text{ si } R > \lambda$$

Ces intégrales peuvent être évaluées à l'aide d'un formulaire tel que celui de GRADSHTEYN et RYZHIK [I68]. Après un calcul relativement long, on obtient :

$$\delta = \frac{K\alpha}{CE_{po}^{n-1}} \left\{ \frac{1}{\alpha^2} (1 - e^{-\alpha R}) - \frac{e^{-\alpha R}}{\alpha \lambda} \frac{R^2}{2} - \frac{R^2}{4} + \frac{R^2}{2} \log \left( \frac{R}{\lambda} \right) + \frac{R^2}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-\alpha)^k}{k k!} \left( \frac{2}{k+2} R^k - \lambda^k \right) \right\} \quad (48) \text{ si } R < \lambda$$

$$= \frac{K\alpha}{CE_{po}^{n-1}} \left\{ \frac{1}{\alpha^2} (1 - e^{-\alpha \lambda}) - \frac{e^{-\alpha \lambda}}{\alpha} \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{4} - \frac{\lambda^2}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-\alpha)^k \lambda^k}{k \cdot k!} \frac{k}{k+2} \right\} \quad (49) \text{ si } R > \lambda$$

La seconde de ces expressions est naturellement de la forme

$$\delta = \frac{K\alpha}{CE_{po}^{n-1}} x C^{te} \quad (50)$$

comme il était aisé de le prévoir d'après la formule (47).

Cette expression nous conduit à une expression réduite universelle dans le domaine  $R > \lambda$  c'est-à-dire en pratique dans le domaine des énergies supérieures à  $E_{poM}$ .

$$\frac{\delta}{\delta_M} = \left( \frac{E_{poM}}{E_{po}} \right)^{n-1} \quad (51)$$

Cette relation n'est pas rigoureuse, cependant, elle doit convenir tout à fait bien comme on peut le constater à l'aide des résultats expérimentaux donnés dans la littérature et de la figure 5.

Il en résulte que la courbe du rendement de l'EEE est universelle dans le domaine  $E_{po} > E_{poM}$  si l'exposant  $n$  de l'exponentielle reliant la portée électronique primaire à l'énergie initiale des électrons incidents est une constante indépendante de la nature du matériau. La portée que l'on doit utiliser ici est la portée moyenne des électrons. COSSLETT et THOMAS [82] ont estimé  $n$  à 1,65 pour l'Al. Pour étendre le contrôle, compte tenu de l'accord qualitatif obtenu pour les valeurs de  $E_{poM}$  et aussi du fait que leur valeur de  $n$  n'est pas très éloignée de celle de COSSLETT et THOMAS, nous avons utilisé dans ce qui suit les valeurs des portées de MARKOV [75]. Dans le tableau 6 nous donnons les valeurs de  $\delta$  en fonction de l'énergie primaire et pour cinq éléments.

Tableau 6

Relation entre la décroissance de  $\delta$  et l'absorption d'énergie

| Elément $\backslash$ $E_{po}$ keV           | 1            | 2            | 3            | 4            |
|---------------------------------------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| Al expérience<br>$n = 1,68$<br>$n_M = 1,68$ | 0,46<br>0,46 | 0,28<br>0,29 | 0,21<br>0,22 | 0,18<br>0,18 |
| Si exp.<br>$n = 1,73$<br>$n_M = 1,65$       | 0,44<br>0,44 | 0,27<br>0,26 | 0,19<br>0,20 | 0,16<br>0,16 |
| Cu exp.<br>$n = 1,50$<br>$n_M = 1,53$       | 1,01<br>1,01 | 0,77<br>0,72 | 0,61<br>0,58 | 0,49<br>0,50 |
| Ge exp.<br>$n = 1,48$<br>$n_M = 1,47$       | 0,82<br>0,82 | 0,65<br>0,59 | 0,49<br>0,48 | 0,42<br>0,42 |
| Bi exp.<br>$n = 1,35$<br>$n_M = 1,44$       | 0,94<br>0,94 | 0,76<br>0,75 | 0,65<br>0,64 | 0,58<br>0,58 |

Pour chacun de ceux-ci on donne, sur la première ligne, les valeurs expérimentales du rendement pour  $E_{po} = 1 ; 2 ; 3$  et  $4$  KeV, sur la seconde les valeurs calculées pour la valeur de  $n$  donnant le meilleur accord avec l'expérience, enfin la valeur  $n_M$  de MAKHOV. Les valeurs calculées le sont de telle façon qu'elles s'accordent aux valeurs expérimentales en  $E_{po} = 1$  keV, ainsi l'on fixe le coefficient de proportionnalité entre  $\delta$  et  $E_{po}^n$ . Les valeurs expérimentales sont de BRONSHTEJN et ses collaborateurs sauf pour le Germanium pour lequel nous avons utilisé les résultats de PALMBERG [57] .

Nous pouvons, à la lecture de ce tableau, faire les remarques suivantes :

- L'accord n'est pas mauvais en général, il est excellent pour Al et Ge. Pour ce dernier élément le désaccord en  $E_{po} = 2$  keV provient d'un renflement de la courbe expérimentale.

- Il est déjà notable que les courbes expérimentales puissent être aussi bien approchées par des fonctions puissances ; il est encore plus remarquable qu'elles le soient pour des valeurs de  $n$  en corrélation avec celles de MAKHOV.

- Contrairement au cas du coefficient d'émission électronique secondaire total, il ne semble pas, tant expérimentalement qu'en raison de la concordance avec les résultats de MAKHOV, qu'il y ait de courbe universelle pour le rendement  $\delta$ . Pour le voir nous avons tracé sur la figure 4 différentes fonctions puissances. Les écarts sont assez grands pour qu'on ne puisse pas admettre, même de façon approchée, qu'une telle courbe existe.

REMARQUE : Il peut sembler contradictoire d'admettre à la fois une absorption exponentielle et une profondeur de libération limitée. En réalité, nous pouvons admettre que l'absorption a lieu en raison du ralentissement du faisceau secondaire, c'est-à-dire de la diminution de son énergie moyenne. Si celle-ci devient inférieure au travail de sortie, aucun électron ne peut plus sortir du métal. Ce schéma est incorrect dans la mesure où c'est l'énergie normale des électrons qui doit être prise en considération et non leur énergie totale. Dès lors nous surestimons les contributions aux grands angles d'émergence. En raison de la prépondérance de l'émission en émergence normale, cette incorrection n'est pas prohibitive.

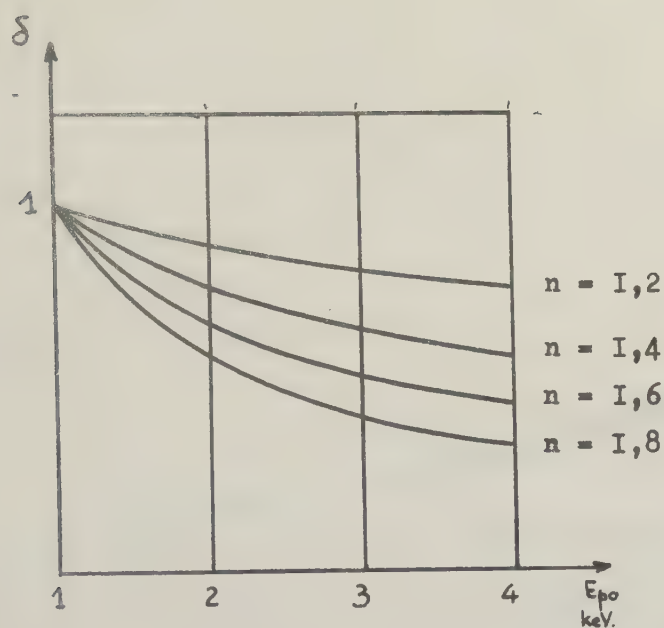


Fig. 6 Courbes  $\delta = E_{po}^{n-1}$

Nous donnons ci-après fig. 7 & 8 les résultats calculés pour Al, Cu, Ge, Si et Bi avec les valeurs choisies pour les paramètres  $n$ ,  $C$ ,  $\lambda$  et  $\alpha$ . Ces valeurs ont été choisies pour que les courbes calculées s'accordent aux résultats expérimentaux.

La valeur de  $K$  est obtenue en amenant en coïncidence les courbes expérimentales et théoriques au point d'abscisse  $E_{po} = 1$  keV.

Notons enfin que la comparaison est difficile à faire en raison de la grande dispersion observée dans les résultats expérimentaux. L'accord obtenu est, dans ces conditions, satisfaisant.

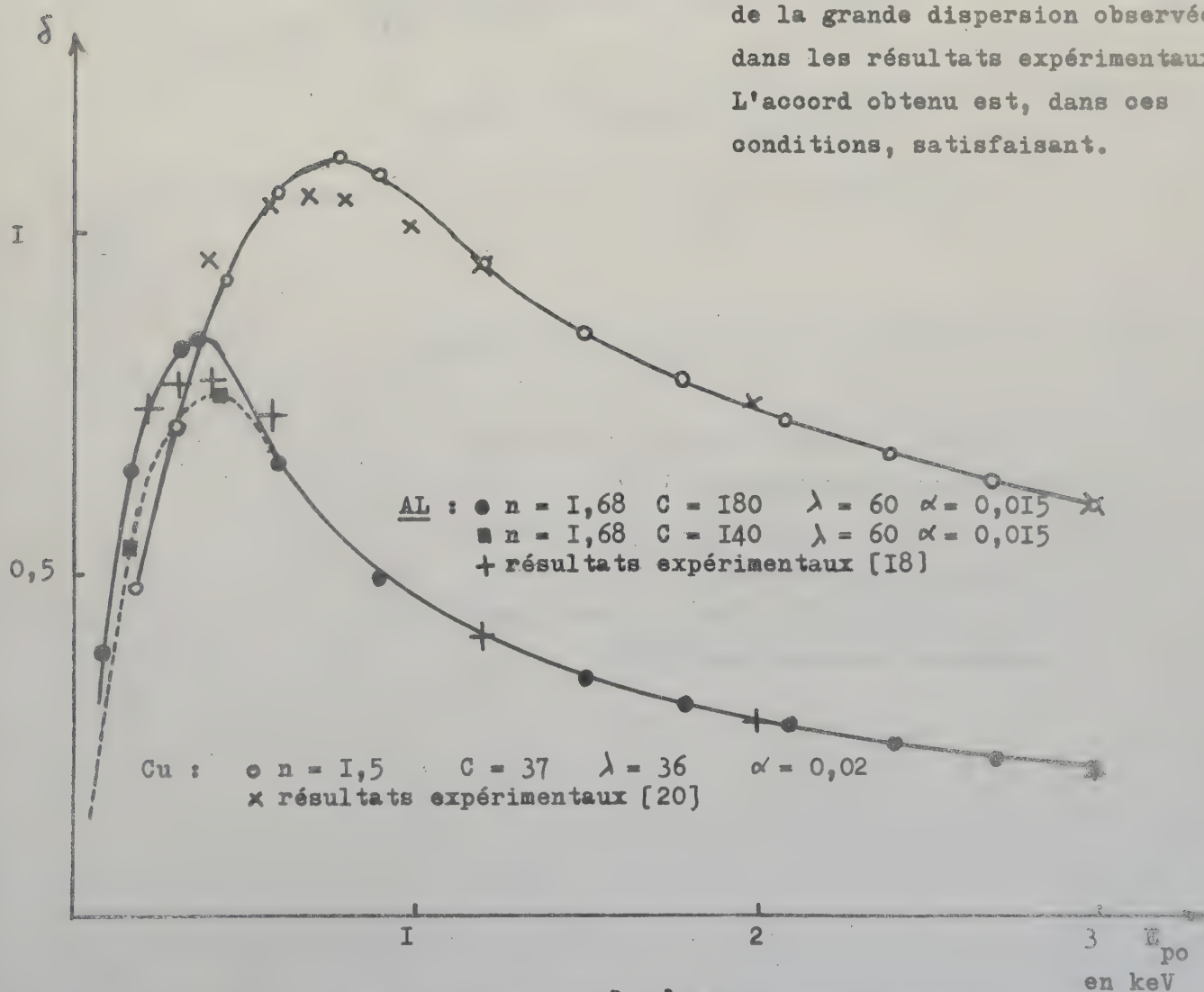


Fig. 7- Courbes  $\delta = \delta(E_{po})$  pour Al et Cu.

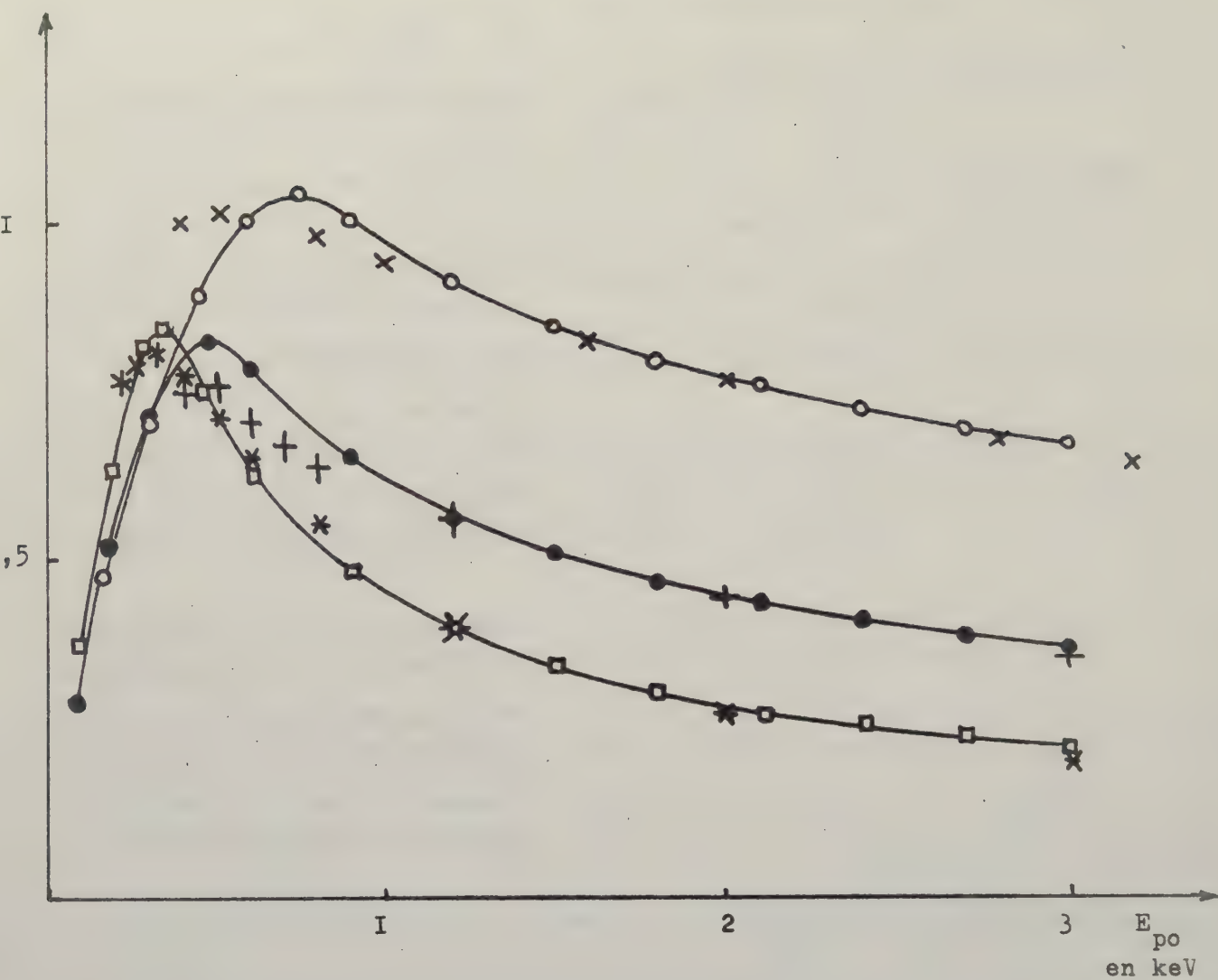


Fig. 8 Courbes  $\delta = \delta(E_{po})$  pour Bi, Si, Ge

- Bi     $\circ$   $n = 1,35$   $C = 255$   $\lambda = 22$   $\alpha = 0,032$   
        $\times$  résultats expérimentaux [17]
- Ge     $\bullet$   $n = 1,48$   $C = 50$   $\lambda = 24$   $\alpha = 0,029$   
        $+$  résultats expérimentaux [20]
- Si     $\square$   $n = 1,65$   $C = 145$   $\lambda = 35$   $\alpha = 0,018$   
        $*$  résultats expérimentaux [18]

### CHAPITRE 3

-:-

GENERALITES SUR LA THEORIE QUANTIQUE

DE L'EMISSION ELECTRONIQUE SECONDAIRE

-:-

CHAPITRE 3

-:-

GENERALITES SUR LA THEORIE QUANTIQUE  
DE L'EMISSION ELECTRONIQUE SECONDAIRE

-:-

|                                                                             |    |
|-----------------------------------------------------------------------------|----|
| 1) INTRODUCTION .....                                                       | 58 |
| 2) THEORIE DU TRANSPORT DES ELECTRONS SECONDAIRES                           | 61 |
| 3) DISCUSSION DE LA THEORIE DU TRANSPORT DES<br>ELECTRONS SECONDAIRES ..... | 74 |

### RESUME DU CHAPITRE 3

Dans ce chapitre, nous avons rappelé la théorie du transport de PUFF qui s'appuie sur l'équation de transport de BOLTZMANN et un certain nombre d'hypothèses telles que l'isotropie de l'excitation initiale des ES et de la diffusion des ES durant leur parcours vers la surface.

Cette diffusion résulte des collisions électron-électron et est supposée isotrope dans le système du centre de masse de l'ES.

Les conditions aux limites sont introduites de façon rigoureuse du point de vue équation de transport mais sans prendre en compte la structure de bandes.

## I/ INTRODUCTION

La théorie quantique de l'émission électronique secondaire des métaux polycristallins telle qu'elle a été formulée jusqu'ici considère quatre processus élémentaires :

1°) l'interaction des électrons primaires avec la surface du solide.

2°) l'excitation des électrons secondaires,

3°) le transport des électrons excités vers la surface du solide.

4°) la traversée de la barrière de potentiel à la surface du solide par les électrons secondaires.

L'étude du premier processus a reçu récemment de nombreux développements dans le cas des solides monocristallins.

Dans le cas des cibles polycristallines, ce processus est pris en compte à l'aide d'un coefficient de réflexion sur la

surface elle-même, c'est-à-dire que l'on considère que l'électron primaire pénètre ou non dans le cristal. S'il ne pénètre pas, il ne participe pas à L'E.E.S. et est déduit du nombre des électrons primaires, cette correction est effectuée sur les résultats expérimentaux. S'il pénètre, il est considéré comme se propageant dans la totalité du cristal.

Les trois autres processus élémentaires sont pris, ensemble, dans la théorie du transport formulée par WOLFF [169] et plus récemment par PUFF [170-172]

Le transport des électrons excités est décrit par l'équation de BOLTZMANN. L'excitation des électrons secondaires intervenant comme condition initiale et la traversée de la barrière de potentiel comme une condition aux limites.

Notre propre travail a porté exclusivement sur les processus d'excitation des électrons secondaires.

Toutefois, puisque nous utiliserons les résultats de la théorie du processus en cascade pour déterminer le rendement et la distribution énergétique des électrons, nous allons décrire la théorie de WOLFF et PUFF.

2/ LA THEORIE DU TRANSPORT

$\vec{\Omega}'$  étant la direction de propagation de l'électron excité, repérée par les cosinus directeurs  $(-\cos \theta', \sin \theta' \cos \varphi', \sin \theta' \sin \varphi')$  l'équation de BOLTZMANN, en régime stationnaire, à l'intérieur du solide, s'écrit :

$$\frac{v'}{l(E'_s)} N_i(x, E'_s, \vec{\Omega}') - v' \cos \theta' \frac{\partial N_i(x, E'_s, \vec{\Omega}')}{\partial x} = S(x, E'_s, \vec{\Omega}') + \int dE'' \cdot d\vec{\Omega}'' p[E'_s, \vec{\Omega}', E''_s, \vec{\Omega}''] \frac{v''}{l(E''_s)} N_i(x, E''_s, \vec{\Omega}'') \quad (52)$$

où  $N_i(x, E'_s, \vec{\Omega}')$  est le nombre d'électrons excités ayant une énergie comprise entre  $E'_s$  et  $E'_s + dE'_s$  et se propageant dans une couche d'épaisseur  $dx$  à la profondeur moyenne  $x$  et dans une direction comprise entre  $\vec{\Omega}'$  et  $\vec{\Omega}' + d\vec{\Omega}'$ . Les distances  $x$  sont comptées à partir de la surface libre du solide soumise au bombardement.

$l(E'_s)$  est le libre parcours moyen des électrons d'énergie  $E'_s$  entre 2 processus de collision électron-électron.

$P [E'_s, \vec{n}', E''_s, \vec{n}'']$  est la probabilité pour qu'un électron qui, initialement se trouve dans l'état  $(\vec{n}'', E''_s)$ , soit, après collision, avec un autre électron dans l'état  $(\vec{n}', E'_s)$ .

$S(x, E'_s, \vec{n}')$  est le terme source et représente la densité des électrons secondaires produits à l'intérieur du solide par le bombardement primaire.

L'équation de BOLTZMANN telle qu'elle est écrite, ne dépend que de  $x$ , sous cette forme, elle convient pour un bombardement électronique sous incidence normale.

A l'extérieur du solide, l'équation de BOLTZMANN s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial x} N_a(x, E'_s, \vec{n}') = 0 \quad (53)$$

de sorte que :

$$N_a(x, E'_s, \vec{n}') = N_a(E'_s, \vec{n}') = c^{te} \quad (54)$$

Entre le solide et le vide existent deux surfaces de séparation, les plans  $x = 0$  et  $x = D$  sur lesquels on impose des conditions aux limites liées à la condition d'émission:

$$\cos^2 \theta' > \frac{W}{E'_S} \quad (55)$$

Ces conditions aux limites s'écrivent pour  $x = 0$  :

$$1) N_a(E'_S, \vec{n}') = N_i(0, E'_S, \vec{n}') \Theta(E'_S - W) \Theta(\cos \theta' - \sqrt{W/E'_S}) \quad (56)$$

où la fonction  $\Theta(x)$  est définie par  $\Theta(x) = 1$  si  $x > 0$   
 $0$  si  $x < 0$

Cette relation traduit que les électrons d'énergie  $E'_S > W$  sont émis si leur vitesse normale est suffisante.

$$2) N_i(0, E', \vec{n}') = N_i(0, E', \theta', \varphi') = N_i(0, E', \pi - \theta', \varphi') \quad (57)$$

pour  $E'_S < W$

et pour  $E'_S > W$  mais  $-\sqrt{W/E'_S} < \cos \theta' < \sqrt{W/E'_S}$

Cette relation (57) traduit que les électrons d'énergie  $E'_S < W$

ou d'énergie  $E'_S > W$  mais de vitesse normale insuffisante ne peuvent franchir la barrière de potentiel et sont réfléchis symétriquement par rapport à la normale à la surface.

En fin aucun électron secondaire ne pouvant provenir de l'extérieur

$$N_i(0, E'_S, \vec{n}') = 0 \quad \text{pour } E'_S > W \quad \text{et} \quad -1 < \cos \theta' < -\sqrt{W/E'_S}.$$

Les conditions aux limites concernant la face arrière sont analogues aux précédentes. Elles s'en déduisent en changeant  $N_a$  en  $N_a'$  ;  $x = 0$  en  $x = D$ ;  $\cos \theta'$  en  $-\cos \theta'$  et en changeant de signe les valeurs extrêmes de  $\cos \theta'$ .

Les distributions externes  $N_a(E_s', \vec{n}')$  sont reliées aux densités de courant  $j(E_s', \vec{n}')$  par :

$$j(E_s', \vec{n}') = v' \cdot |\cos \theta'| \cdot N_a(E_s', \vec{n}') \quad (58)$$

ainsi :

$$j_r(E_s', \vec{n}') = v' \cos \theta' N_i(0, E_s', \vec{n}') \Theta(E_s' - W) \Theta(\cos \theta' - \sqrt{\frac{W}{E_s'}}) \quad (59)$$

et :

$$j_t(E_s', \vec{n}') = -v' \cos \theta' N_i(D, E_s', \vec{n}') \Theta(E_s' - W) \Theta(-\sqrt{\frac{W}{E_s'}} - \cos \theta') \quad (60)$$

Les densités de courant externes sont exprimées ici en fonction des grandeurs internes  $E_s', \vec{n}'$ . En pratique, elles le sont en fonction des grandeurs externes  $E_s, \vec{n}$  où  $\vec{n}$  est défini par les cosinus directeurs  $(-\cos \theta, \sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi)$ .

Entre les grandeurs internes et les grandeurs externes, nous avons les relations :

$$j_{t,r}(E_s, \vec{\Omega}) dE_s d\vec{\Omega} = j_{t,r}(E'_s, \vec{\Omega}') dE'_s d\vec{\Omega}' \quad (61)$$

avec :

$$\begin{aligned} E'_s &= E_s + W \\ \cos^2 \theta' &= \frac{E_s \cos^2 \theta + W}{E_s + W} \\ \varphi' &= \varphi \end{aligned} \quad (62)$$

La première égalité traduit la conservation de l'énergie, la seconde s'obtient en combinant la conservation de la composante tangentielle de l'impulsion ( $v' \sin \theta' = v \sin \theta$  ;  $\varphi' = \varphi$ ) avec la conservation de l'énergie.

Deux hypothèses fondamentales sont faites sur la fonction de dispersion  $p [E'_s, \vec{\Omega}'; E''_s, \vec{\Omega}']$

a) chaque collision s'effectue avec une perte d'énergie de l'électron excité  $E''_s > E'_s$ .

b) la fonction de dispersion ne dépend pas séparément de  $\vec{\Omega}'$  et  $\vec{\Omega}''$  mais simplement du produit scalaire  $(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}'')$ .

Ainsi :

$$p [E'_s, \vec{\Omega}'; E''_s, \vec{\Omega}'] = p [E'_s, E''_s, (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}'')] \otimes (E''_s - E'_s) \quad (63)$$

l'équation de BOLTZMANN peut se transformer à l'aide du changement de variable :

$$N_1(x, E'_s, \vec{n}') = \frac{1(E'_s)}{v} \left\{ \psi(x, E'_s, \vec{n}') \oplus (E'_s - W) + \tilde{\psi}(x, E'_s, \vec{n}') \right. \\ \left. \oplus (W - E'_s) \right\} \quad (64)$$

On peut ainsi séparer les fonctions  $\psi$  et  $\tilde{\psi}$ . Seule l'équation de  $\psi$  nous intéresse. Elle s'écrit :

$$\psi(x, E'_s, \vec{n}') = 1(E'_s) \cos \theta' \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, E'_s, \vec{n}') = S(x, E'_s, \vec{n}') \\ + \int_{E_s}^{\infty} dE''_s \int d\vec{n}'' p[E'_s, E''_s; (\vec{n}', \vec{n}'')] \psi(x, E''_s, \vec{n}'') \quad (65)$$

C'est une équation intégral-différentielle inhomogène

dont le second membre peut s'écrire

$$j(x, E'_s, \vec{n}') = S(x, E'_s, \vec{n}') + \int_{E_s}^{\infty} dE''_s \int d\vec{n}'' p[E'_s, E''_s, (\vec{n}', \vec{n}'')] \\ \cdot \psi(x, E''_s, \vec{n}'') \quad (66)$$

La résolution de cette équation s'appuie sur l'utilisation des fonctions de GREEN. (cf. MORSE et FESHBACH p 914) [173]

Rappelons qu'une équation de la forme

$$\psi(x) = \lambda \int K(x, x_0) \psi(x_0) dx_0 + \chi(x) \quad (67)$$

peut se réécrire :

$$\psi(x) = \chi(x) + \lambda \int G_\lambda(x, x_0) \chi(x_0) dx_0 \quad (68)$$

à l'aide de la fonction de GREEN  $G_\lambda$  définie par :

$$G_{\lambda}(x, x_0) = K(x, x_0) + \lambda \int K(x, x_1) G_{\lambda}(x_1, x_0) dx_1 \quad (69)$$

La fonction  $\psi(x, E'_s, \vec{n}')$  prend la forme :

$$\psi(x, E'_s, \vec{n}') = \left\{ A(E'_s, \vec{n}') - \frac{1}{l(E'_s) \cos \theta'} \right\} \int_0^x dx' e^{\frac{(x-x')}{l(E'_s) \cos \theta'}} + j(x', E'_s, \vec{n}') + A(E'_s, \vec{n}') \int_x^D dx' e^{\frac{(x-x')}{l(E'_s) \cos \theta'}} j(x', E'_s, \vec{n}') \quad (70)$$

où la fonction  $A(E'_s, \vec{n}')$  est déterminée par les conditions aux

limites et s'écrit :

$$A(E'_s, \vec{n}') = \frac{\Theta(\cos \theta' - \sqrt{\frac{W}{E'_s}})}{l(E'_s) \cos \theta'} + \frac{\Theta(\sqrt{\frac{W}{E'_s}} - \cos \theta') \Theta(\cos \theta' + \sqrt{\frac{W}{E'_s}})}{2 \cdot l(E'_s) \cos \theta' \operatorname{sh} \left[ \frac{D}{l(E'_s) \cos \theta'} \right]}$$

$$\int_0^D dx' \left[ e^{\frac{D-x'}{l(E'_s) \cos \theta'}} j(x', E'_s, \vec{n}') + e^{\left( -\frac{D-x'}{l(E'_s) \cos \theta'} \right)} j^{(-)}(x', E'_s, \vec{n}') \right]$$


---


$$\int_0^D dx' e^{\frac{-x'}{l(E'_s) \cos \theta'}} j(x', E'_s, \vec{n}') \quad (71)$$

Dans cette expression :

$$j^{(-)}(x', E'_s, \vec{n}') = j(x', E'_s, \pi - \theta', \psi') \quad (72)$$

La connaissance de  $A(E'_s, \vec{n}')$  donc aussi celle de  $\psi(x, E'_s, \vec{n}')$

est liée à la connaissance d'une part de  $l(E'_s)$  d'autre part de

$$j(x', E'_s, \vec{n}')$$

Notons qu'en raison des relations (59) et (64) l'expression de

$j_r(E'_s, \vec{n}')$  s'écrit très simplement

$$j_r(E'_s, \vec{n}') = \Theta(E'_s - W) \Theta(\cos \theta' - \sqrt{\frac{W}{E'_s}}) \int_0^D dx' e^{-\frac{x'}{l(E'_s) \cos \theta'}}$$

$$j(x', E'_s, \vec{n}') = (E'_s - W) \left( \cos \theta' - \sqrt{\frac{W}{E'_s}} \right) j_1(E'_s, \vec{n}') \quad (73)$$

où l'on a utilisé la notation

$$j_1(E'_s, \vec{n}') = \int_0^D dx' e^{-\frac{x'}{l(E'_s) \cos \theta'}} j(x', E'_s, \vec{n}') \quad (74)$$

De façon analogue :

$$j_t(E'_s, \vec{n}') = \Theta(E'_s - W) \Theta\left(-\sqrt{\frac{W}{E'_s}} - \cos \theta'\right) \int_0^D dx' e^{\frac{D-x'}{l(E'_s) \cos \theta'}} j(x', E'_s, \vec{n}')$$

$$= \Theta(E'_s - W) \Theta\left(-\sqrt{\frac{W}{E'_s}} + \cos \theta'\right) \int_0^D dx' e^{\frac{-x'}{l(E'_s) \cos \theta'}} j^{(-)}(x', E'_s, \vec{n}')$$

$$= \Theta(E'_s - W) \Theta\left(-\sqrt{\frac{W}{E'_s}} + \cos \theta'\right) j_2(E'_s, \vec{n}') \quad (75)$$

Le problème consiste à déterminer les deux grandeurs

$$j_1(E'_s, \vec{n}') \quad \text{et} \quad j_2(E'_s, \vec{n}')$$

La résolution générale de ce problème est compliquée,

le lecteur intéressé pourra se reporter aux articles originaux de PUFF. Nous nous limiterons ici à indiquer seulement les équations intégrales auxquelles obéissent ces deux grandeurs dans le cas particulier de la dispersion isotrope où :

$$p [E_s, E_s'', (\vec{n}', \vec{n}'')] = \frac{1}{2\pi E_s''} \quad (76)$$

Ces deux équations sont :

$$\begin{aligned} j_1(E_s', \vec{n}') \pm j_2(E_s', \vec{n}') &= \int_0^D dx' \cdot e^{\frac{-x'}{l(E_s') \cos \theta'}} \left\{ \tilde{S}(x', E_s', \vec{n}') \right. \\ &\quad \pm S^{(-)}(D-x', E_s', \vec{n}') + \frac{1}{2\pi E_s'} \int_{E_s'}^{\infty} dE_s'' (1 + \text{Log} \frac{E_s''}{E_s'}) \\ &\quad \int d\vec{n}'' \Theta(\sqrt{\frac{W}{E_s''}} - \cos \theta'') \Theta(\cos \theta'') \frac{l(E_s') \cos \theta'}{l(E_s') \cos \theta' + l(E_s'') \cos \theta''} \\ &\quad \left. \left\{ j_1(E_s'', \vec{n}'') \pm j_2(E_s'', \vec{n}'') \right\} \right\} \quad (77) \end{aligned}$$

La fonction  $\tilde{S}(x', E_s', \vec{n}')$  obéissant à l'équation:

$$\tilde{S}(x', E_s', \vec{n}') = - \int_{E_s'}^{\infty} dE_s'' \cdot \exp \left\{ \int_{E_s'}^{E_s''} dE_s''' \frac{1}{E_s'''} h(x', D, E_s''') \right\} \cdot$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial S(x', E_s'', \vec{n}')}{\partial E_s''} + \int_0^D dx'' \int_{E_s'}^{\infty} \frac{dE_s''}{E_s''} \exp \left\{ \int_{E_s'}^{E_s''} dE_s''' \frac{1}{E_s'''} h(x', D, E_s''') \right\} \\
& \times \left\{ \frac{1}{2\pi} \int d\vec{n}'' \left[ \frac{\Theta(\cos \theta'')}{l(E_s'') \cos \theta''} \cdot \frac{x'' - x'}{l(E_s'') \cos \theta''} \Theta(x'' - x') \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{\Theta(-\cos \theta'')}{l(E_s'') \cos \theta''} \cdot \frac{x' - x''}{l(E_s'') \cos \theta''} \Theta(x' - x'') \right] S(x'', E_s'', \vec{n}'') \right. \\
& \left. + \frac{1}{l(E_s'')} E_i \left( - \frac{|x'' - x'|}{l(E_s'')} \right) S(x'', E_s'', \vec{n}'') \right\} \quad (78)
\end{aligned}$$

où :

$$E_i(-z) = - \int_z^{\infty} dz' \frac{1}{z'} \quad \text{e}^{-z'} \quad \text{pour } z > 0 \quad (79)$$

et :

$$h(x', D, E) = - \frac{I}{l(E)} \int_0^D dx \quad E_i \left( - \frac{|x-x'|}{l(E)} \right) \quad (80)$$

Finalement si nous admettons que l'excitation est isotrope et

a lieu au point de portée effective R des électrons primaires :

$$S(x', E_s', \vec{n}') = S(x', E_s') = S(E_s', E_p) \cdot R \cdot \delta(x' - R) \quad (81)$$

alors

$$j_r(E_s, \vec{\Omega}) = \frac{-E_s \cos \theta}{E_s + W} \sqrt{\frac{E_s + W}{E_s \cos^2 \theta + W}} R \exp \left\{ -\frac{R}{l(E_s + W)} \sqrt{\frac{E_s + W}{E_s \cos^2 \theta + W}} \right.$$

$$\times \int_{E_s + W}^{\infty} dE'_s \exp \left\{ \int_{E_s + W}^{E'_s} dE''_s \frac{I}{E''_s} h(R, D, E''_s) \right\} \frac{\partial}{\partial E'_s} S(E'_s, E_p)$$
(82)

La distribution angulo-énergétique relative correspondante est :

$$j_{r \text{ rel}}(E_s, \vec{\Omega}) = \cos \theta \sqrt{\frac{E_s + W}{E_s \cos^2 \theta + W}} \exp \left\{ -\frac{R}{l(E_s + W)} \left( \sqrt{\frac{E_s + W}{E_s \cos^2 \theta + W}} - 1 \right) \right\}$$
(83)

Par contre, si l'excitation supposée isotrope a lieu

tout au long du parcours  $R$  de l'électron primaire :

$$S(x', E'_s, \vec{\Omega}') = S(x', E'_s) = S(E'_s, E_p) \otimes (R - x') \quad (84)$$

$$j_r(E_s, \vec{\Omega}) = -l(E_s + W) \frac{E_s \cos \theta}{E_s + W} \int_{E_s + W}^{\infty} dE'_s \left\{ \frac{E'_s}{E'_s + W} \left( 1 + \ln \frac{E'_s}{E'_s + W} \right) \right.$$

$$\left. - \left( \frac{E'_s}{E'_s + W} \right)^2 e^{-\frac{R}{l(E_s + W)} \sqrt{\frac{E_s + W}{E_s \cos^2 \theta + W}}} \right\} \frac{\partial}{\partial E'_s} S(E'_s, E_p)$$
(85)

pour :  $l(E_s + W) < R < D - l(E_s + W)$

Il est possible de transformer ces expressions pour y faire apparaître la fonction  $S(E'_s, E_p)$  elle-même au lieu de sa dérivée.

En particulier la dernière relation s'écrit :

$$j_r(E_s, \vec{\Omega}) = l(E_s + W) \frac{E_s \cos \theta}{E_s + W} \left\{ S(E_s + W) \left( 1 - \frac{R}{l(E_s + W)} \sqrt{\frac{E_s + W}{E_s \cos^2 \theta + W}} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{E_s + W} \int_{E_s + W}^{\infty} dE'_s S(E'_s) \left( 2 + \ln \frac{E'_s}{E_s + W} - \frac{2 E'_s}{E_s + W} \right) \right. \\ \left. - \frac{R}{l(E_s + W)} \frac{E_s + W}{E_s \cos^2 \theta + W} \right\} \quad (86)$$

qui prend la forme simplifiée suivante :

$$j_r(E_s, \vec{\Omega}) = l(E_s + W) \frac{E_s \cos \theta}{E_s + W} \left\{ S(E_s + W) + \frac{1}{E_s + W} \int_{E_s + W}^{\infty} dE'_s S(E'_s) \left( 2 + \ln \frac{E'_s}{E_s + W} \right) \right\} \quad (87)$$

si l'on suppose :  $R \gg l(E_s + W)$

Finalement nous obtenons le rendement secondaire par intégration sur les angles et par rapport à l'énergie :

$$\delta(E_p) = \frac{m\Omega}{\hbar K} \int_W^\infty l(E_s) dE_s \int_0^{2\pi} d\psi \int_{\cos\theta > \sqrt{\frac{W}{E_s}}} d\theta \sin\theta j_r(E_s, \vec{\Omega}) \quad (88)$$

L'équation de WOLFF correspondant à la relation (87)

précédente s'écrit :

$$j_r(E_s, \vec{\Omega}) = l(E_s + W) \frac{E_s \cos\theta}{E_s + W} \left\{ S(E_s + W) + \frac{2}{(E_s + W)^2} \int_{E_s + W}^\infty S(E'_s) E'_s dE'_s \right\} \quad (89)$$

3°/ Discussion de la théorie du transport

Les théories du transport dont nous avons utilisé les résultats représentent l'une [169] et l'autre [170 - 172] sur l'équation de transport de BOLTZMANN. Plusieurs points méritant de retenir plus longtemps notre attention.

1°) Pour qu'un ES puisse quitter le métal il est nécessaire que son énergie, mesurée par rapport au bas de la bande de conduction, soit supérieure au travail de sortie  $W = E_F + \phi$ . Pratiquement elle doit être de 3 à 5 eV au-dessus du niveau de FERMİ, c'est-à-dire dans un domaine où les effets du principe d'exclusion de PAULI sont déjà sérieusement affaiblis. C'est pourquoi les collisions électron-électron deviennent prépondérantes par rapport aux autres (collisions électron-phonon et électron-impuretés chargées ou défauts) dans la limitation du lpm des ES. Les interactions électron-phonon se produisent sans aucun doute mais le fait que l'EES soit indépendante de la température indique qu'elles ne jouent qu'un rôle mineur dans le processus de freinage. Ceci justifie qu'en première analyse on s'entienne à un seul lpm celui des collisions électron-électron.

2°) La théorie n'a de sens que si l'épaisseur de la couche participant à l'EES est très supérieur au lpm des ES pour que cette dernière quantité soit faible devant la distance effectivement parcourue par les électrons lors de leur trajet vers la surface. On peut supposer que cette condition est assez bien vérifiée pour les électrons prenant naissance vers la fin du parcours des EP lorsque la profondeur de pénétration de ces derniers est supérieure à la profondeur de sortie d des ES. Par contre l'approximation doit devenir mauvaise pour les électrons secondaires qui ont pris naissance près de la surface. En d'autres termes, l'approximation doit être acceptable pour les électrons qui ont subi de nombreuses collisions lors de leur trajet de sortie c-à-d pour les électrons de faible énergie, par contre elle doit sous-estimer le nombre des électrons de grande énergie. C'est bien ce que donne le calcul si l'on utilise les lpm évalués à l'aide des expressions de QUINN et de RITCHIE et ASHLEY.

Un contrôle de la théorie du transport de WOLFF et PUFF pourrait s'effectuer en suivant la marche aléatoire des électrons excités à l'aide de la méthode de MONTE-CARLO. Ce procédé a été utilisé de façon intensive dans l'étude théorique de la photoémission.

Cependant nous pouvons garder l'essentiel de notre confiance dans la théorie du transport formulée à l'aide de l'équation de BOLTZMANN sur la base de l'argument suivant.

Si nous supposons vraie l'hypothèse suivant laquelle le nombre d'ES d'énergie  $E_S$  créés par électron primaire est proportionnel à  $\frac{I}{E_{po}} \log \frac{2 E_{po}}{E_S}$  (cette relation est celle que nous utilisons dans le chap. 5); alors nous pouvons en déduire que le rapport des nombres d'ES créés avec une même énergie mais pour 2 valeurs différentes  $E'_{po}$  et  $E''_{po}$  de l'énergie primaire est égal à:

$$\frac{Q(E_{SI}) E'_{po}}{Q(E_{SI}) E''_{po}} = \frac{E''_{po}}{E'_{po}} \frac{\log(2 E'_{po} / E_{SI})}{\log(2 E''_{po} / E_{SI})}$$

Conservant à  $E'_{po}$  et  $E''_{po}$  les mêmes valeurs que précédemment mais donnant à  $E_S$  la nouvelle valeur  $E_{S2}$  nous constatons que le rapport défini ci-dessus demeure approximativement constant si  $E'_{po}$  et  $E''_{po}$  sont très supérieurs à  $E_{SI}$  et  $E_{S2}$ . La distribution énergétique initiale étant pratiquement indépendante de  $E_{po}$ , les variations obtenues dans la distribution externe seront caractéristiques du transport. Or HACHENBERG et

BRAUER [7] rapportent que cette distribution externe est indépendante de  $E_{po}$  dès que cette énergie dépasse 20 eV. Bien que les mesures plus récentes de PALMBERG [57] n'apportent pas de confirmation aux résultats antérieurs, elles ne révèlent aucun changement dans la nature qualitative de la structure de la distribution énergétique des ES et même les changements quantitatifs qui s'y manifestent demeurent modérés.

3°) Une autre hypothèse simplificatrice a été émise par WOLFF et PUFF. C'est l'assimilation des ES à des électrons libres. WOLFF l'estime tout à fait raisonnable pour les métaux alcalins et les métaux nobles. Pour le cuivre que nous avons étudié plus particulièrement dans le chap.5, on peut noter avec SLATER [203] que la structure de bandes  $\alpha$  au voisinage et au dessus du niveau de FERMİ un comportement qui possède certaines analogies mais aussi de grandes différences avec la structure correspondante obtenue dans l'approximation des électrons libres. L'analogie se manifeste particulièrement dans l'existence des bandes

$\Delta_I X_4 Z_3 W_3 Q_2 L_2 \Lambda_I$  et  $\Sigma_I X_I$ . Les différences sont nota-

bles dans le dédoublement des niveaux  $(X_4', X_I)$  et  $(L_2', L_I)$ .

La structure de bandes de l'Argent [204-205] est tout à fait similaire à celle du Cuivre avec cependant une plus grande profondeur des bandes d par rapport au niveau de FERMI. La largeur des seuils  $(X_4', X_I)$  et  $(L_2', L_I)$  est exactement du même ordre de grandeur que dans le cuivre, par contre les niveaux sont légèrement décalés vers le bas par rapport à leur position dans Cu. Le comportement individuel des ES ne doit pas être très différent dans l'un et l'autre élément, mais la plus grande profondeur des bandes d dans l'Argent conduit à la séparation du pic de plasmon et du domaine des transitions entre bandes donc à des comportements collectifs différents. Ceux-ci n'ont pas été pris en compte dans le transport. Dans leur étude de la photoémission de l'Argent, BERGLUND et SPICER <sup>[206-207]</sup> n'ont trouvé aucune preuve expérimentale de la diffusion électronique par création de plasmon. Leur résultat ne peut pas être extrapolé en toute certitude à la totalité du domaine d'énergie des ES. Nous pouvons, cependant, considérer comme rassurant pour nos objectifs qu'ils aient trouvé que la diffusion électron-électron était le processus de diffusion inélastique dominant pour les électrons énergétiques dans leur domaine d'énergie car le lpm de ces collisions dé-

croît quand l'énergie croît dans le domaine d'énergie des ES.

L'approximation des électrons libres se manifeste aussi dans les conditions aux limites retenues. En effet à la traversée de la surface limitant le solide nous négligeons toute structure de bande dans le franchissement de la barrière de surface. L'introduction des bandes devrait tenir compte de leur déformation au voisinage de la surface. Nous pouvons noter que APPELT [140] a estimé à l'aide de l'indice de réfraction mesuré pour les ES conduit pour la direction  $\Delta$  à un comportement des électrons qui ne s'éloigne guère de celui des électrons libres.

Finalement, nous pouvons remarquer que la présence des seuils d'énergie ( $X_4^I$ ,  $X_I$ ) et ( $L_2^I$ ,  $L_I$ ) ne perturbent qu'assez peu les densités d'états dans la mesure où un nombre suffisamment important d'états existent encore dans le domaine d'énergie impliqué par ces seuils.

4°) Dans l'une et l'autre des théories l'hypothèse est faite de la diffusion isotrope des électrons lors de leur collision avec les autres électrons du solide. Cette hypothèse a été justifiée par WOLFF qui a montré par un calcul en ondes partielles que l'onde  $s$  diffusée est beaucoup plus importante que les autres même à des énergies s'élevant jusqu'à 50 eV. Cette prépondérance de l'onde  $s$  s'appuie sur le caractère courte portée de l'interaction électronique. Dans une première approximation cette hypothèse doit très bien convenir.

## CHAPITRE 4

-:-

### THEORIE MICROSCOPIQUE

-:-



## CHAPITRE 4

-:-

## THEORIE MICROSCOPIQUE

-:-

|                                                              |     |
|--------------------------------------------------------------|-----|
| I/ EXCITATION PAR INTERACTION INDIVIDUELLE .....             | 83  |
| A/ FORMULATION GENERALE .....                                | 83  |
| B/ FORMULATION DANS L'APPROXIMATION DES ELECTRONS LIBRES ... | 87  |
| 2/ EXCITATION PAR INTERACTION COLLECTIVE .....               | 100 |

-:-

Résumé du chapitre 4

Dans ce chapitre nous avons rappelé la théorie quantique de l'excitation des ES dans l'approximation des électrons libres, et pour des excitations individuelles.

Nous avons appliqué la théorie au cas particulier de l'Al. Les résultats obtenus sont en désaccord avec les résultats expérimentaux.

Nous avons évalué la contribution des excitations collectives du plasma qui résulte du couplage des plasmons aux électrons du réseau. Les processus d'amortissement pris en compte sont l'excitation d'une paire d'électrons loin en dessous du cut-off et l'excitation monoélectronique au voisinage de celui-ci.

Un meilleur accord est obtenu.

# THEORIE MICROSCOPIQUE

## A/ FORMULATION GENERALE

L'excitation des électrons du réseau métallique par les électrons primaires s'effectue par l'intermédiaire de leur interaction électrostatique. Nous pouvons faire une analyse de Fourier de cette interaction :

$$V_{\text{eff}}(\vec{R} - \vec{r}, t) = \sum_{\vec{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \exp [ + i \vec{q} (\vec{R} - \vec{r}) - i\omega t ] \quad (90)$$

Dans cette expression  $|\vec{R} - \vec{r}|$  est la distance entre les électrons interagissant.

$\vec{R}$  est la position de l'électron primaire,

$\vec{r}$  celle de l'électron du réseau. Nous supposons que les électrons se comportent individuellement.

I°/ Nous considérons une fréquence circulaire particulière  $\omega$ .

L'interaction correspondante s'écrit :

$$V(\vec{R} - \vec{r}, \omega) = \sum_{\vec{q}} \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \exp [ i \vec{q} (\vec{R} - \vec{r}) ] \exp (-i\omega t)$$

(91)

Par application de la théorie des perturbations dépendantes du

temps, et en se limitant au premier ordre, le coefficient  $a_{k'}^{(1)}(t)$

de la fonction d'onde finale s'écrit :

$$a_{k'}^{(1)}(t) = -\frac{V_{k'k}^{'0}}{\hbar} \frac{\exp[i(\omega_{k'k} - \omega)t] - 1}{\omega_{k'k} - \omega} - \frac{V_{k'k}^{''0}}{\hbar} \frac{\exp[i(\omega_{k'k} + \omega)t] - 1}{\omega_{k'k} + \omega} \quad (92)$$

avec :

$$V_{k'k}^{'0} = \sum_{\vec{q}} \langle u_{k'} | \frac{4e^2}{q^2} \cdot \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) | u_k \rangle \langle u_{K'}(\vec{R}) | \exp(i\vec{q} \cdot \vec{R}) | u_K(\vec{R}) \rangle \quad (93)$$

$$\text{et } V_{k'k}^{''0} = (V_{k'k}^{'0})^* \quad (94)$$

Nous conservons seulement le premier terme de l'expression (92)

le second, correspondant à une perte d'énergie du réseau, ne peut

conduire à l'émission électronique secondaire.

Ainsi :

$$|a_{k'k}^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{k'k}^{'0}|^2}{\hbar^2} \frac{4\sin^2[(\omega_{k'k} - \omega) \frac{t}{2}]}{(\omega_{k'k} - \omega)^2} \quad (95)$$

Le terme  $\left| a_{k'}^{(1)}(t) \right|^2$  donne le taux des transitions vers l'état  $\vec{k}'$  d'énergie  $E_{k'} = \hbar\omega_{k'}$

Si nous considérons le groupe d'états finals correspondant au domaine d'énergie d'étendue  $dE_{k'}$  autour de la valeur  $E_{k'}$  il y a dans ce domaine  $\rho(E_{k'}) dE_{k'}$  états. Nous pouvons intégrer sur  $E_{k'}$  pour connaître le taux total des transitions vers ces états. En divisant par  $t$  nous obtenons la probabilité de transition par unité de temps :

$$S(\vec{K}, \vec{k} \rightarrow \vec{K}', \vec{k}') = \frac{1}{t} \int \left| a_{k'}^{(1)}(t) \right|^2 \rho(E_{k'}) dE_{k'} \quad (96)$$

$$\approx \frac{1}{t} \rho(E_{k'}) \frac{|V_{k'k}^0|^2}{\hbar^2} 4 \int \frac{\sin^2\left[(\omega_{k'k} - \omega)\frac{t}{2}\right]}{(\omega_{k'k} - \omega)^2} d(\hbar\omega_{k'k})$$

La valeur de l'intégrale est  $\frac{1}{2} \pi t \delta(\omega_{k'k} - \omega)$ . Ainsi la probabilité par unité de temps pour qu'un électron du réseau transite de l'état  $\vec{k}$  vers un des états  $\vec{k}'$  tandis que l'électron primaire transite de l'état  $\vec{K}$  vers l'état  $\vec{K}'$  est :

$$S(\vec{K}, \vec{k} \rightarrow \vec{K}', \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_{k'}) |V_{k'k}^0|^2 \delta[\hbar(\omega_{k'k} - \omega)] \quad (97)$$

2°/ Si le système est soumis à l'action d'une perturbation non monochromatique nous devons considérer une combinaison linéaire de termes semblables à (9I).

Si la perturbation est monochromatique c'est par exemple le cas si l'électron primaire est supposé libre et si l'on néglige le recul de cet électron. Alors  $\hbar\omega = \vec{q} \cdot \vec{v}_e$  où  $\vec{q} = \vec{K} - \vec{K}'$  la grandeur de la charge primaire est  $2\pi \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_e)$ .

Le résultat de l'intégration en  $\omega$  donne I pour résultat.

REMARQUE : Dans cette théorie  $u_k$  et  $u_k'$  sont les fonctions d'onde du système à N électrons que constitue le solide.

Si l'on fait l'hypothèse que les électrons du solide se comportent individuellement, les fonctions d'onde du solide sont obtenues comme des combinaisons linéaires de produits des fonctions d'onde individuelles. L'élément de matrice ne fait intervenir que les fonctions d'onde d'un électron  $u_k(\vec{r})$  et  $u_k'(\vec{r})$

# B / FORMULATION DANS L'APPROXIMATION DES ELECTRONS LIBRES

Ici nous considérons que les électrons du réseau et l'électron primaire sont libres avant et après leur interaction.

Dans ce cas :

$$\langle u_{\vec{k}'} | \exp(-i \vec{q} \cdot \vec{r}) | u_{\vec{k}} \rangle = \delta(\vec{q} - \vec{k} + \vec{k}') \quad (98)$$

$$\sum_{\vec{q}} \langle u_{\vec{k}'} | \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \exp(i \vec{q} \cdot \vec{r}) | u_{\vec{k}} \rangle = \sum_{\vec{q}} \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \delta(\vec{q} + \vec{k} - \vec{k}')$$

$$V_{\vec{k}'\vec{k}}^{\circ} = \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \delta(\vec{q} + \vec{k} - \vec{k}') \quad (99)$$

Dans cette expression la sommation sur toutes les valeurs de  $\vec{q}$  a été réalisée et  $\vec{q}$  est une écriture abrégée pour  $\vec{k} - \vec{k}'$ .

La fonction diélectrique  $\epsilon(\vec{q}, \omega)$  a été calculée dans l'approximation des électrons libres par LINDHARD [174]\*. Elle comporte une partie réelle  $\epsilon_1$  et une partie imaginaire  $\epsilon_2$  :

---

\* Des évaluations plus récentes de la constante diélectrique dynamique ont été faites par :

GLICK (A.J) Phys. Rev 1963, 129, p 1399

et COHN (R.J) Thesis, University of Maryland 1967

$$\epsilon_1 = 1 + \frac{\alpha_{rs}^2}{\pi} \frac{1}{z^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{8z} [1 - (z - \mu)^2] \log \left| \frac{z - \mu + 1}{z - \mu - 1} \right| \right. \\ \left. + \frac{1}{8z} [1 - (z + \mu)^2] \log \left| \frac{z + \mu + 1}{z + \mu - 1} \right| \right\} \quad (100)$$

$$\epsilon_2 = \alpha_{rs} \mu \frac{1}{2z^2} \quad \text{si} \quad |z + \mu| \leq 1 \quad (101)$$

$$= \alpha_{rs} \frac{1}{8z^3} \quad \text{si} \quad |z - \mu| \leq 1 \leq |z + \mu|$$

Avec l'expression ci-dessus de  $V_{k'k}^{',0}$  la probabilité de transition  $S(\vec{K}, \vec{k} \rightarrow \vec{K}', \vec{k}')$  s'écrit :

$$S(\vec{K}, \vec{k} \rightarrow \vec{K}', \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \left[ \frac{16\pi^2 e^4}{|\vec{K} - \vec{K}'|^4} \frac{1}{|\epsilon(\vec{K} - \vec{K}', \omega)|^2} \right. \\ \left. \delta(\vec{K} - \vec{K}' + \vec{k} - \vec{k}') \delta(E_K + E_K - E_{k'} - E_{k'}) \rho(E_{k'}) \right] \quad (102)$$

avec  $\rho(E_{k'}) = \frac{2\Omega}{8\pi^3}$  (on prendra  $\Omega = 1$ )

La fonction d'onde décrivant les électrons primaires correspond à un flux  $\frac{\hbar K}{m}$

La probabilité de création d'un état d'énergie  $E_{k'}$  est obtenue par sommation sur  $\vec{k}$  et  $\vec{K}'$ . La sommation sur  $\vec{K}'$  se réalise à l'aide de la première fonction  $\delta$ . La seconde fonction  $\delta$  devant dans la même sommation :

$$\frac{m}{\hbar^2} \delta [(\vec{k} - \vec{k}', \vec{k}' - \vec{k})]$$

L'argument de cette fonction exprime l'orthogonalité des deux vecteurs  $\vec{k} - \vec{k}'$  et  $\vec{k}' - \vec{k}$ . Quant à la sommation sur  $\vec{k}$  elle peut être remplacée par une intégration impliquant la densité d'états  $\rho(k) = \frac{2}{8\pi^3}$ . Ainsi par élément de volume  $d^3\vec{k}'$  on obtient  $S(\vec{k}') d^3\vec{k}'$  transitions par unité de temps avec :

$$S(\vec{k}') = \frac{2e^4 m}{\pi^3 \hbar^3} \int \frac{1}{q^4 |\epsilon(\vec{q}, \omega)|^2} \delta[(\vec{k} - \vec{k}', \vec{k}' - \vec{k})] d^3\vec{k} \quad (103)$$

L'intégration en  $\vec{k}$  est compliquée dans le cas général.

Par contre, elle peut se réaliser analytiquement dans certains cas simples en particulier si l'on fait l'approximation grossière :

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 \quad (104)$$

Il en résulte une singularité en  $q = 0$  c'est-à-dire pour

$E_{\vec{k}'} = E_F$ . Toutefois, en pratique, cette divergence n'a pas de conséquences graves car elle est supprimée par la condition de sortie des électrons secondaires.

collimation impose à l'exercice de l'alignement relatif d'une expérience

au travail de sortie  $W$ . Le fait que la différence  $W - E_m$  soit

de plusieurs  $eV$  améliore sensiblement la qualité de l'approximation.

L'approximation  $\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1$  a été retenue par STREITWOLF [175 - 176], STOLZ [177 - 178] et PUFF [179 - 180].

L'intégration se fait en coordonnées sphériques, l'axe polaire étant orienté suivant le vecteur  $\vec{K} - \vec{k}'$ . Les bornes d'intégration sont alors  $(-\pi, +\pi)$  pour  $\varphi$ ,  $(-1, +1)$  en  $\cos \theta$  et  $(k' \cos \delta_0, k_p)$  en  $k$ . La borne inférieure de l'intégration en  $k$  fait intervenir l'angle  $\delta_0$  des vecteurs  $\vec{K} - \vec{k}'$  et  $\vec{k}'$  et est imposée par la seconde fonction  $\delta$  qui s'écrit :

$$\delta \left\{ (\vec{K} - \vec{k}', \vec{k}' - \vec{k}) \right\} = \frac{1}{|\vec{K} - \vec{k}'| k} \delta \left( \xi - \frac{k' \cos \delta_0}{k} \right) \quad (105)$$

Sous cette forme on voit que l'égalité :

$$\cos \theta = \xi = \frac{k' \cos \delta_0}{k}$$

ne peut avoir lieu que si  $k > k' \cos \delta_0$ .

Le résultat global de l'intégration est :

$$S(\vec{k}', \vec{K}) d^3\vec{k}' = \frac{me^4}{\pi^2 \hbar^3} \frac{k_F^2 |\vec{K} - \vec{k}'|^2 - (\vec{K} - \vec{k}', \vec{k}')^2}{(k'^2 - k_F^2)^2 |\vec{K} - \vec{k}'|^3} \quad (106)$$

$$\Theta(k'^2 - k_F^2) \Theta \left\{ k_F^2 |\vec{K} - \vec{k}'|^2 - (\vec{K} - \vec{k}', \vec{k}')^2 \right\} d^3\vec{k}'$$

la deuxième fonction  $\Theta$  peut être transformée en :

$$\Theta(k'^2 - k_F^2) \Theta \left\{ (k'^2 - k_F^2 + k_F \sqrt{K^2 + k_F^2 - k'^2} - (\vec{K}, \vec{k}')) \right\} \\ \Theta \left\{ (\vec{K}, \vec{k}') - (k'^2 - k_F^2 - k_F \sqrt{K^2 + k_F^2 - k'^2}) \right\} \quad (107)$$

comme indiqué dans l'article de PUFF.

Nous pouvons maintenant passer des variables  $\vec{k}'$  et  $\vec{K}$  aux variables  $E'_s, \vec{\Omega}'$  et  $E_p, \vec{\Omega}_p$  par :  $\vec{k}' = \sqrt{\frac{2mE'_s}{\hbar^2}} \vec{\Omega}'$ ,  $\vec{K} = \sqrt{\frac{2mE_p}{\hbar^2}} \vec{\Omega}_p$

$$\text{et } S(\vec{k}', \vec{K}) d^3\vec{k}' = S[E'_s, E_p, (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p)] dE'_s d\vec{\Omega}' \quad (108)$$

On obtient ainsi la fonction :

$$S(E'_s, E_p, (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p)) = \frac{me^4}{2\pi^2 \hbar^3} E_s'^{1/2} \frac{\Theta(E_p - E'_s) \Theta(E'_s - E_F)}{(E'_s - E_F)^2} \quad (109) \\ \frac{E_F [E_p + E'_s - 2 \sqrt{E_p E'_s} (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p)] - [E'_s - \sqrt{E_p E'_s} (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p)]^2}{[E_p + E'_s - 2 \sqrt{E_p E'_s} (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p)]^{3/2}} \\ \Theta \left\{ [E'_s - E_F + \sqrt{E_p} (E_p + E_F - E'_s)] - \sqrt{E_p E'_s} (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p) \right\} \\ \Theta \left\{ \sqrt{E_p E'_s} (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p) - [E'_s - E_F - \sqrt{E_p} (E_p + E_F - E'_s)] \right\}$$

Si l'on admet que le faisceau primaire conserve sa direction initiale les processus d'excitation admettent dans l'approximation des électrons libres une très forte anisotropie dans les directions perpendiculaires à la direction de propagation du faisceau primaire. La fonction  $S$  est développée suivant les polynômes de LEGENDRE  $P_l [(\vec{n}', \vec{n}_p)]$

$$S [E'_s; E_p, (\vec{n}', \vec{n}_p)] = \sum_{l=0}^{\infty} S_l (E'_s, E_p) P_l [(\vec{n}', \vec{n}_p)] \quad (\text{II0})$$

Les coefficients du développement sont obtenus à l'aide de la relation d'orthogonalité.

$$\int_{-1}^{+1} P_l(w) P_{l'}(w) dw = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (\text{III})$$

(cf. SCHIFF p 73 [181])

$$S_l (E'_s, E_p) = \frac{e^4 m}{4 \pi^2 \hbar^3} \frac{\mathcal{H}(E_p - E'_s) \mathcal{H}(E'_s - E_F)}{E_p^{1/2} (E'_s - E_F)^2} \cdot \frac{2l+1}{2} I_l (E'_s, E_p) \quad (\text{II2})$$

où :

$$I_l (E'_s, E_p) = \frac{1}{4} \int_{z_1}^{z_2} dz \frac{4 E_F z - [z - (E_p - E'_s)]^2}{z^{3/2}} \cdot P_l \left( \frac{E_p + E'_s - z}{2 \sqrt{E_p E'_s}} \right) \quad (\text{II3})$$

$$z = E_p + E'_s - 2 \sqrt{E_p E'_s} \quad (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p) \quad (\text{II4})$$

Les bornes d'intégration sont :

$$z_I = \left( \sqrt{E_p + E_F - E'_s} - \sqrt{E_F} \right)^2 \quad (\text{II5})$$

$$\text{et } z_2 = \left( \sqrt{E_p + E_F - E'_s} + \sqrt{E_F} \right)^2$$

Les fonctions  $I_l (E'_s, E_p)$  correspondant aux plus faibles valeurs de  $l$  ont été calculées par PUFF et s'expriment par :

$$I_0 (E'_s, E_p) = \frac{8}{3} E_F^{3/2} \quad (\text{II6})$$

$$I_1 (E'_s, E_p) = \frac{8}{15} \frac{E_F^{3/2}}{(E_p E'_s)^{1/2}} (5 E'_s - 2 E_F)$$

$$I_2 (E'_s, E_p) = \frac{4}{105} \frac{E_F^{3/2}}{E_p E'_s} \left\{ 105 E'^2_s - 35 E'_s (E_p + 3 E_F) + 3 E_F (7 E_p + 12 E_F) \right\}$$

$$I_3 (E'_s, E_p) = \frac{4}{315} \frac{E_F^{3/2}}{(E_p E'_s)^{3/2}} \left\{ 525 E'^3_s - 315 E'^2_s (E_p + 3 E_F) + 9 E_F E'_s (49 E_p + 80 E_F) - 20 E_F^2 (9 E_p + 10 E_F) \right\}$$

L'approximation  $S_n$  de la fonction excitation est définie par :

$$S_n [E'_s, E_p, (\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p)] = \sum_{l=0}^n S_l (E'_s, E_p) P_l [(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}_p)] \quad (\text{II7})$$

L'excitation étant anisotrope, le problème de transport est résolu suivant la méthode des ondes partielles (cf. WOLFF et PUFF 1962). Le rendement s'exprime alors à l'aide de la relation

$$\delta [E_p] = \frac{m}{hK} \int_w^\infty l(E'_s) \cdot dE'_s \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{\cos \theta' > \sqrt{\frac{w}{E'_s}}} d\theta' \sin \theta' \cos \theta' \quad (II8)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l \int_0^\infty dE'' \Gamma_l(E'_s, E''_s) S_l(E''_s, E_p) P_l(\cos \theta')$$

Les fonctions  $\Gamma_l$  sont définies par l'équation intégrale-différentielle

$$\Gamma_l(E'_s, E''_s) = p_l(E'_s, E''_s) + \int_{E_F}^\infty dE_s p_l(E'_s; E_s) \Gamma_l(E_s, E''_s) \quad (II9)$$

où les  $p_l$  sont les coefficients du développement de la fonction de dispersion  $p$  suivant les polynômes de LEGENDRE. En utilisant la transformation de MELLIN (cf. MORSE et FESHBACH P. 484) on montre que :

$$\Gamma_l(E'_s, E''_s) = \frac{1}{2\pi i E''_s} \int_{\mathbb{L}_1} ds \frac{4 C_l(s)}{1 - 4 C_l(s)} \left( \frac{E''_s}{E'_s} \right)^s \quad (I20)$$

$\Gamma_1$  est un contour d'intégration parallèle à l'axe imaginaire du plan  $s$  complexe et passant à droite de toutes les singularités de l'intégrant.

Les coefficients  $c_1(s)$  sont définis par la relation :

$$c_1(s) = \int_0^1 dx \cdot x^{2s-1} P_1(x) = \frac{\Gamma(s + \frac{1}{2}) \cdot \Gamma(s)}{2 \Gamma(s + \frac{1}{2} + 1) \Gamma(s + \frac{1}{2} - \frac{1}{2})} \quad (121)$$

et peuvent être calculés en utilisant la relation de récurrence de la fonction  $\Gamma$  (cf. par ex. WHITTAKER et WATSON) (182)

$$\Gamma(s+1) = s \cdot \Gamma(s) \quad (122)$$

on obtient ainsi :

$$\Gamma_0(E'_s, E''_s) = \frac{2}{E_s^2} E''_s \quad (123)$$

$$\Gamma_1(E'_s, E''_s) = \frac{2}{E_s''} \left( \frac{E''_s}{E_s} \right)^{3/2}$$

$$\Gamma_2(E'_s, E''_s) = \frac{1}{\sqrt{E_s' E_s''}} \cdot 2 \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \log \frac{E''_s}{E_s'} \right)$$

$$\Gamma_3(E'_s, E''_s) = \frac{2}{E_s''} \left[ \cos \left( \frac{\sqrt{11}}{2} \log \frac{E''_s}{E_s'} \right) - \frac{2}{\sqrt{11}} \sin \left( \frac{\sqrt{11}}{2} \log \frac{E''_s}{E_s'} \right) \right]$$

L'intégration en  $E_s''$  peut être réalisée analytiquement pour

les plus faibles valeurs de  $l$  ainsi :

$$\delta_o(E_p) = \frac{2}{3} \frac{k_F}{\pi} \frac{E_R E_F}{E_p} \int_W^{E_{Max}} \frac{l(E_s'')^2 dE_s''}{E_s'^2} \left( 1 - \frac{W}{E_s'} \right) \quad (124)$$

$$\left[ \text{Log} \left| \frac{E_{Max} - E_F}{E_s' - E_F} \right| + E_F \left( \frac{1}{E_s' - E_F} - \frac{1}{E_{Max} - E_F} \right) \right]$$

où  $E_{Max}$  est l'énergie secondaire au-dessus de laquelle la fonction excitation est supposée identiquement nulle :

$$k_F = \frac{I}{\alpha r_s a_0} \quad \alpha = \left( \frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} \simeq 0,521$$

$$a_0 = 0,52915 \text{ \AA}$$

$r_s$  est une constante caractéristique du métal étudié

$E_R$  est l'énergie de Rydberg et vaut 13,60 eV.

$E_p$  est l'énergie primaire

$W$  le travail de sortie

$$E_F = \frac{E_R}{(\alpha r_s)^2}$$

De façon analogue les approximations suivantes s'écrivent :

$$\delta_1(E_p) = - \frac{8 k_F}{30 \pi} \frac{E_R E_F}{E_p^{3/2}} \int_w^{E_{Max}} dE'_s \left[ 1 - \left( \frac{W}{E'_s} \right)^{3/2} \right] \frac{1}{E'_s^{3/2}} \quad (125)$$

$$\left[ 5 \operatorname{Log} \left| \frac{E_{Max} - E_F}{E'_s - E_F} \right| + 3 E_F \left( \frac{1}{E'_s - E_F} - \frac{1}{E_{Max} - E_F} \right) \right]$$

$$\delta_2(E_p) = - \frac{2 k_F E_R E_F}{3 \pi E_p} \int_w^{E_{Max}} dE'_s \left[ \frac{3}{2} \left( 1 - \frac{W^2}{E'^2_s} \right) - \left( 1 - \frac{W}{E'_s} \right) \right] \frac{1}{E'_s^2}$$

$$\sum_{J=0}^{\infty} \frac{(2J+3)(J+1)}{(2J+3)^2 + 3} \left\{ \left( \frac{E'_s}{E_{Max}} \right)^3 \left( \frac{E_F}{E_{Max}} \right)^J \left[ \frac{\sqrt{3}}{2J+3} \sin \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \operatorname{Log} \frac{E_{Max}}{E'_s} \right) - \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \operatorname{Log} \frac{E_{Max}}{E'_s} \right) \right] + \left( \frac{E_F}{E'_s} \right)^J \right\} \quad (126)$$

Nous avons évalué ces diverses quantités pour l'aluminium en utilisant les paramètres suivants :

$$E_{Max} = 100 \text{ eV}$$

$$r_s = 2$$

La sommation sur  $J$  dans le calcul de  $\delta_2(E_p)$  a été effectuée pour  $J$  variant de 0 à 9. Dans le tableau 7 nous indiquons la variation des diverses approximations pour  $J$  croissant de 0 à 9 dans le cas du sodium. Nous pouvons voir, dans le cas le plus défavorable où  $E' = 12 \text{ eV}$ , que le rapport du terme  $J = 9$  au terme  $J = 0$  est d'environ  $10^{-5}$ , la précision du calcul

va croissante au fur et à mesure que  $E'_s$  augmente et est par ex. supérieure à  $10^{-6}$  pour  $E'_s = 15,5$  e V.

Le lpm des électrons entre deux collisions électron-électron a été évalué au moyen de l'expression de RITCHIE et ASHLEY (cf. l'appendice). Les résultats pour l'aluminium sont représentés sur la figure 9.

Nous pouvons remarquer que la théorie formulée dans le cadre des excitations individuelles et de l'approximation des électrons libres est insuffisante pour justifier les résultats expérimentaux qui sont représentés sur la même figure à titre de comparaison. On a grossièrement

$$\delta_{thior} = 0.2 \quad \text{à} \quad 0.3 \quad \delta_{exp}$$

TABLEAU 7

| E'    | J | BRAC     |
|-------|---|----------|
| 12,00 | 0 | 0,25     |
|       | 1 | 0,93 -01 |
|       | 2 | 0,27 -01 |
|       | 3 | 0,76 -02 |
|       | 4 | 0,20 -02 |
|       | 5 | 0,54 -03 |
|       | 6 | 0,14 -03 |
|       | 7 | 0,38 -04 |
|       | 8 | 0,10 -04 |
|       | 9 | 0,26 -05 |
| 15,50 | 0 | 0,25     |
|       | 1 | 0,69 -01 |
|       | 2 | 0,15 -01 |
|       | 3 | 0,32 -02 |
|       | 4 | 0,65 -03 |
|       | 5 | 0,13 -03 |
|       | 6 | 0,25 -04 |
|       | 7 | 0,51 -05 |
|       | 8 | 0,10 -05 |
|       | 9 | 0,19 -06 |

Les trois dernières colonnes du tableau indiquent la puissance de 10 par laquelle il faut multiplier la valeur de BRAC.

Ex :     0,93 -01   =   0,93 . 10<sup>-1</sup>

2/ EXCITATION PAR INTERACTION COLLECTIVE

# CREATION ET AMORTISSEMENT DES PLASMONS.

Nous avons, dans l'appendice, passé en revue les travaux de ADLER, QUINN et FERRELL sur la perte d'énergie des électrons d'énergie supérieure au niveau de Fermi.

Nous allons, dans ce paragraphe, considérer le problème du point de vue nombre de trous positifs excités hors de la mer de Fermi.

La probabilité par unité de temps de création d'un plasmon, l'électron primaire étant simultanément diffusé dans l'angle solide  $d\Omega$  est donnée par la relation :

$$P(\Omega) d\Omega = \frac{\hbar \omega_p}{2\pi a_0 P} \frac{d\Omega}{\theta^2 + \left(\frac{\hbar \omega_p}{2E_p}\right)^2} = \frac{\hbar \omega_p}{2\pi \cdot 2E_p} \frac{V_e}{a_0} \frac{d\Omega}{\theta^2 + \left(\frac{\hbar \omega_p}{2E_{po}}\right)^2} \quad (I27)$$

Dans ces conditions le temps de création d'un plasmon est :

$$\tau_c = 2\pi \cdot \frac{2E_p}{\hbar \omega_p} \frac{a_0}{V_e} \left[ \theta^2 + \left( \frac{\hbar \omega_p}{2E_{po}} \right)^2 \right] \quad (I28)$$

où  $V_e = \frac{P}{m}$  est la vitesse de l'électron primaire.

DUBOIS [183,184] a estimé le temps de vie d'un plasmon pour différents processus de décroissance. NINHAM, POWELL et SWANSON [185] ont repris les travaux de DUBOIS et corrigé certaines erreurs de calcul. Ils ont montré que pour un plasmon de vecteur d'onde réduit  $q = \frac{k}{k_F}$  le temps de vie est pour un processus de décroissance par excitation de deux paires électrons-trous :

$$\tau_d = \frac{2\hbar}{\Gamma_I(q)} = \frac{\hbar}{\Delta E_{I/2}} = 2 \frac{\hbar}{\frac{\pi}{60} q^2 \Omega_p^3 [10 \ln 2 + 2] \cdot 2E_F} \quad (129)$$

$$\text{où } \Omega_p = \frac{\hbar \omega_p}{2 E_F} = \left( \frac{4 \alpha r_s}{3\pi} \right)^{1/2} \quad (130)$$

$$\text{et } q_{\min} \leq q \leq q_0 \quad q_{\min} = \frac{\Omega_p}{p} \quad q_0 = \frac{k_0}{k_f}$$

$\Delta E_{I/2}$  est la demi-largeur de la raie de plasmon.

Le temps total nécessaire pour la création et la destruction du plasmon par création de deux paires est ainsi :

$$\tau = \tau_0 + \tau_d \quad (131)$$

Ainsi la probabilité par unité de temps pour que ceci ait

lieu est :

$$P(\Omega) = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{a(\theta^2 + \theta_o^2) + \frac{b}{\theta^2 + \theta_o^2}} \quad (132)$$

$$\text{en posant : } a = 4\pi \frac{E_p}{\hbar\omega_p} \frac{a_o}{V_e} \quad (133)$$

$$b = \frac{60}{\pi} \frac{E_F}{E_p} \left( \frac{2 E_F}{\hbar\omega_p} \right)^3 \frac{1}{10 \ln 2 + 2} \frac{\hbar}{E_F}$$

$$\text{et } \theta_o = \frac{\hbar\omega_p}{2 E_{po}}$$

Pour obtenir la probabilité totale pour tous les angles de diffusion on doit intégrer en  $\theta$  de 0 à  $\theta_{cI}$  où  $\theta_{cI} = \frac{k_{cI}}{p}$ ,  $k_{cI}$  est le plus petit vecteur d'onde pour lequel la décroissance des plasmons peut se faire par excitation d'une seule paire électron-trou.

En réalité, la borne supérieure d'intégration n'est pas définie avec précision, toutefois cette imprécision est sans grande importance aux énergies primaires suffisamment grandes. On peut utiliser comme rapport de cut-off  $q_{cI}$  le quotient  $\frac{\hbar\omega_p}{2E_F}$  et si l'on prend pour fréquence plasmon la valeur correspondant à une longueur

d'onde infinie on obtient la valeur approchée  $q_{CI} = 0,471 r_s$

Une meilleure approximation est obtenue en tenant compte de la relation de dispersion des plasmons, pour cela, on trace la courbe représentant les variations du rayon interélectronique moyen  $r_s$  en fonction du rapport de cu-off réduit en utilisant l'expression qu'en a donné FERRELL (cf. Fig 10).

Pour l'aluminium en utilisant les valeurs :

$$\hbar\omega_p = 15,3 \text{ eV}$$

$$E_F = 12 \text{ eV}$$

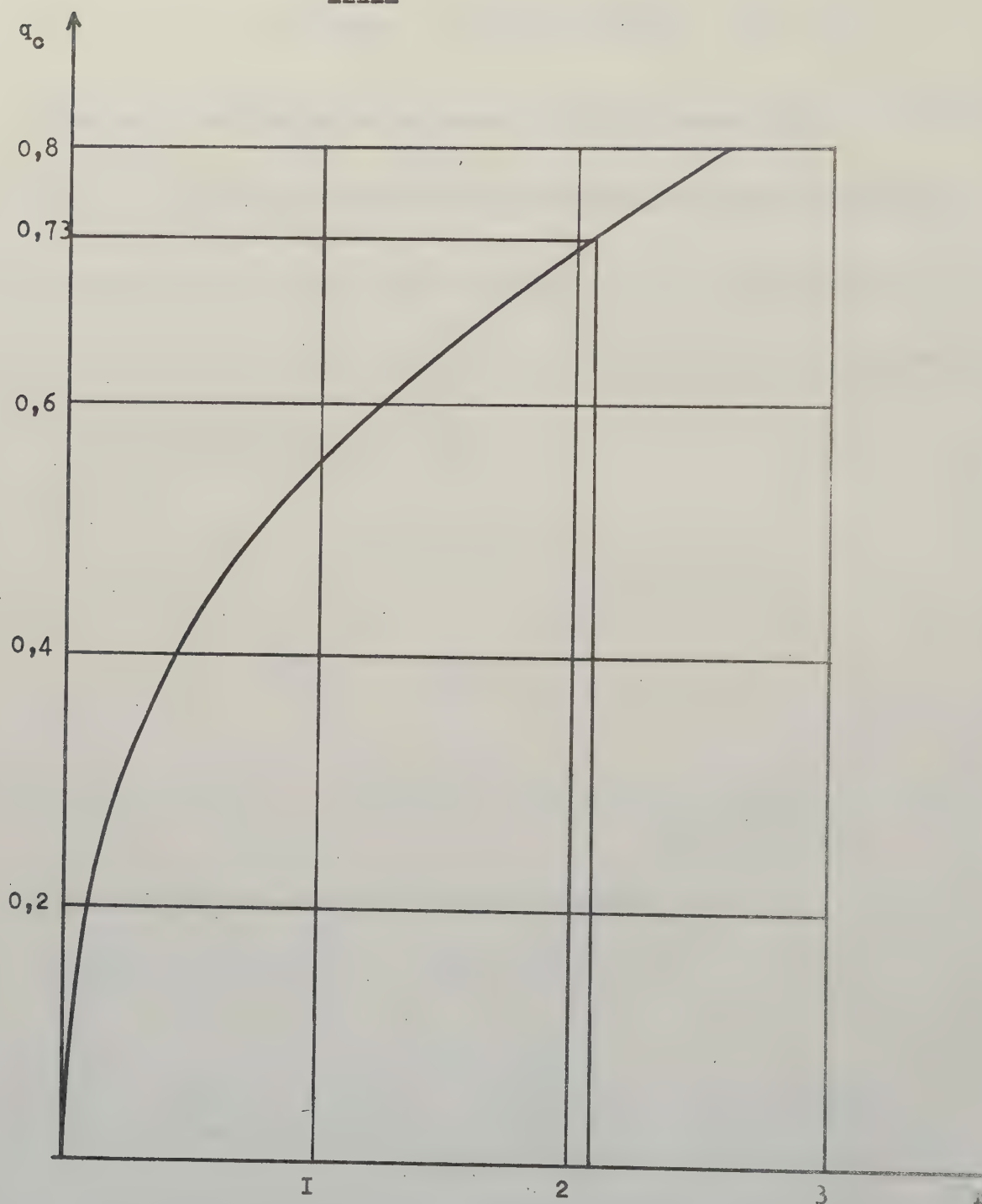
on obtient l'expression suivante pour la probabilité par unité de longueur de parcours de l'électron primaire, pour qu'un plasmon soit excité puis désexcité en créant deux paires électrons-trous

$$P = \frac{3,6}{E_{po}} \left[ 1 + \frac{0,56}{\sqrt{E_{po}}} \right] \quad (134)$$

Dans cette expression  $E_{po}$  est en eV et  $P$  en  $\text{A}^{-1}$ . Pour une énergie primaire  $E_{po} = 1000 \text{ eV}$   $P = 0,004$  or, dans chacun de ces processus, il y a création de 2 paires, donc excitation de deux électrons.

Autrement dit, il y a excitation par ce processus de  
0,008 électrons par  $\text{\AA}^0$  parcouru par l'électron primaire.

figure 10



Courbe  $q_c = q_c(r_s)$  d'après FERRELL [186]

$$r_s = 6,02 \cdot q_c^2 \left[ (2 + q_c) \ln \left( 1 + \frac{2}{q_c} \right) - 2 \right]^{-1}$$

## AMORTISSEMENT DES PLASMONS PAR EXCITATION D'UNE PAIRE ELECTRON-TROU

La probabilité par unité de temps, de création d'un plasmon

l'électron primaire étant diffusé suivant la direction  $\Omega$  est :

$$P_I(\Omega) = \frac{I}{a(\theta^2 + \theta_o^2)} = \frac{I}{2\pi} \frac{\hbar \omega_p}{2E} \frac{V_e}{a_o} \frac{I}{\theta^2 + \left(\frac{\hbar \omega_p}{2E}\right)^2} \quad (I35)$$

Cette formule correspond à un temps de création  $\tau_I = \frac{I}{P_I(\Omega)}$  (I36)

Le plasmon créé a un temps de vie  $\tau_2$ , ainsi le temps total nécessaire pour la création et la destruction d'un plasmon est la somme  $\tau_I + \tau_2$ .

En réalité, nous avons fait cette hypothèse pour un mode particulier de décroissance correspondant à un temps de vie prolongé de l'excitation collective qui constitue alors un mode d'excitation bien défini.

Nous allons maintenant supposer que cette hypothèse s'applique encore pour des vecteurs d'onde de plasmons voisins du cu-off.

La probabilité par unité de temps pour qu'un plasmon soit créé et amorti est :

$$P(\Omega) = \frac{1}{\tau_1 + \tau_2} = \frac{1}{\tau} \quad (I37)$$

$\tau$  est à priori une fonction de l'impulsion et de l'énergie du plasmon. Bien qu'en pratique il soit nécessaire de faire la correction indiquée par QUINN, nous négligerons pour commencer la variation de l'énergie du plasmon en fonction de l'impulsion.

Si  $q \ll q_0$  l'amortissement du plasmon est faible, le temps de désexcitation est très supérieur au temps de création.

Si  $q \sim q_0$  l'amortissement du plasmon est grand, le temps de désexcitation petit devant le temps de création. Le cut-off correspondra à l'égalité des temps de création et de création-destruction.

Les deux expressions (I36) et (I37) conduisent à l'interprétation de la fonction  $G^{-I}$  introduite par FERRELL [I86] pour rendre compte de la diminution du taux d'excitation des plasmons comme le rapport des temps de création-destruction et de création

$$G^{-I} = 1 - \frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2} = \frac{\tau_2}{\tau_1 + \tau_2} \quad (I38)$$

FERRELL a donné deux approximations pour la fonction  $G^{-1}$ , l'une

$$G^{-1} = 1 - \frac{6}{5} \gamma^2 \left( \frac{k}{k_F} \right)^2 + \left( \frac{18}{35} \gamma^4 - \frac{1}{2} \gamma^2 \right) \left( \frac{k}{k_F} \right)^4 \quad (I39)$$

$$\text{où } \gamma = \frac{E_F}{\hbar \omega_p} = 1,061 r_s^{-1/2} \quad (I40)$$

convient pour  $k/k_c$  petit, l'autre

$$G^{-1} = \frac{32 \gamma^3 q_c^4}{3} \text{Log} \frac{1}{f} \quad (I41)$$

$$\text{avec } f \text{Log} \frac{1}{f} = \frac{1}{2 + q_c} \left[ 2 + \frac{8 \gamma^2 q_c^2 (4 + q_c)}{3} \right] y$$

$$y = q_c - \frac{k}{k_F} \quad q_c \equiv \frac{k_c}{k_F}$$

tient au voisinage du cut-off.

Une difficulté se présente dans la détermination du cut-off.

A défaut d'autres renseignements, nous utiliserons pour l'aluminium

la valeur expérimentale  $k_c = 1,5 \text{ \AA}^{-1}$  obtenue par WATANABE \* [I87]

pour des électrons primaires d'énergie 40 keV. Cette valeur de  $k_c$

correspond à un vecteur d'onde réduit de 0,857.

Nous avons représenté fig. II les deux approximations de  $G^{-1}$

de FERRELL, ainsi que la courbe représentative de la fonction :

\* ce résultat nous a été confirmé par le Dr SUNDY.

$\sqrt{1 - \left(\frac{k}{k_c}\right)^2}$  que nous avons choisie pour approcher les données de

FERRELL. Nous pouvons voir qu'un accord excellent a été obtenu. En

particulier au voisinage de  $k = 0$  nous obtenons :

$$G^{-1} \approx 1 - 0,68 \left(\frac{k}{k_F}\right)^2 \text{ alors que FERRELL donne } G^{-1} \approx 1 - 0,64 \left(\frac{k}{k_F}\right)^2$$

Si l'on prend comme probabilité de création des plasmons

compte tenu de l'amortissement

$$dP'' = \frac{I}{a_0} \frac{P}{m} \theta_E \frac{\theta d\theta}{\theta_E^2 + \theta^2} \sqrt{1 - \frac{P^2 \theta^2}{\hbar^2 k_c^2}} \quad (I42)$$

et

$$dP' = \frac{I}{a_0} \frac{P}{m} \theta_E \frac{\theta d\theta}{\theta_E^2 + \theta^2} \quad (I43)$$

comme probabilité de création des plasmons sans tenir compte de l'amor-

tissement, on obtient en faisant la différence de ces deux expressions

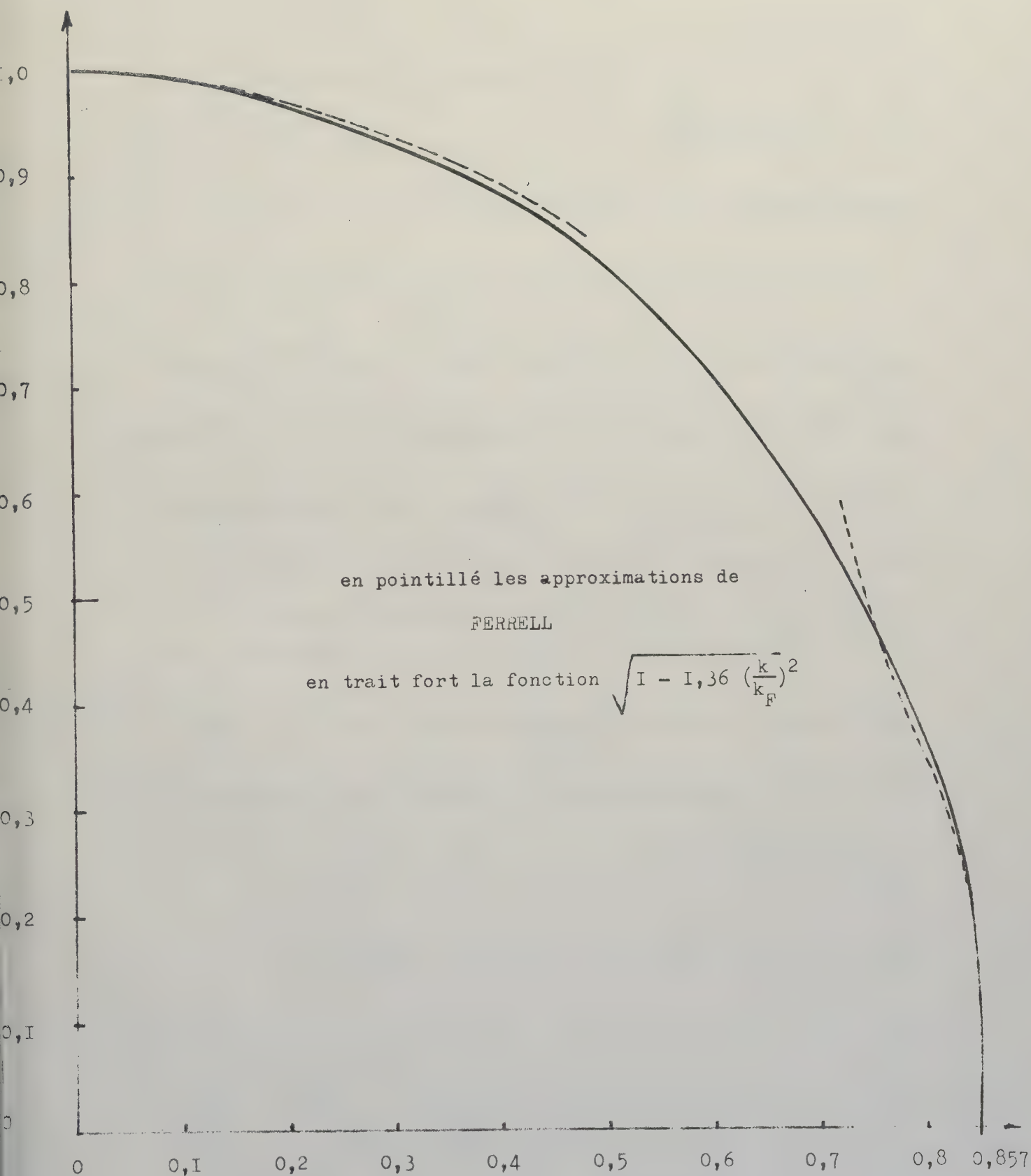
la probabilité, par unité de temps, pour qu'un plasmon soit créé puis

détruit, l'électron primaire étant diffusé dans la direction  $\Omega$ .

En intégrant de  $\theta = 0$  jusqu'à l'angle de cut-off  $\theta = \theta_0$  on

obtient la probabilité totale par unité de temps

$$P = \frac{I}{a_0} \frac{P}{m} \theta_E \left[ \sqrt{1 - \frac{I}{4q_0^2} \frac{E/E}{E_F/E}} - \text{Log} \left( 1 + \sqrt{1 - \frac{I}{4q_0^2} \frac{\Delta E/E}{E_F/\Delta E}} \right) \right] \quad (I44)$$

Figure II : Fonction  $G^{-I}$  de FERRELL

Si  $E \gg \hbar\omega_p$

$$P \approx \frac{1}{a_0} \frac{\Delta E}{2 E}$$

pour  $E = 1000 \text{ eV}$   $P \approx 0,015 \text{ \AA}^{-1}$

Si l'on retranche de cette quantité la probabilité par unité de longueur pour qu'un plasmon soit créé puis détruit en excitant deux paires électrons-trous, et si l'on admet que le seul autre processus important pour l'amortissement des plasmons est, au voisinage du cut-off la création d'une paire électron-trou, nous pouvons estimer de façon grossière à 0,011 le nombre d'électrons créés par ce dernier processus par unité de longueur de parcours de l'électron primaire, soit approximativement une contribution analogue à celle de l'autre processus.

L'évaluation du paragraphe précédent nous a donné la probabilité totale d'excitation par amortissement de plasmons mais ne nous a donné aucun renseignement sur la distribution énergétique ni sur la distribution angulaire. Nous admettrons que la distribution est isotrope et que d'autre part elle est proportionnelle à la densité des états initiaux et des états finals des électrons :

$$S(E'_k) = P \times C^{te} \times \rho(E_k) \times \rho(E'_k) \quad (I45)$$

Pour les interactions n'intéressant qu'un seul électron :

$$E'_k = E_k + \hbar \omega_p \quad (I46)$$

$$\text{il vient : } S(E'_k) = P \times C^{te} \times \rho(E'_k - \hbar \omega_p) \rho(E'_k) \quad (I47)$$

La constante multiplicative est obtenue par normalisation

et vaut :

$$\int_{\hbar \omega_p}^{E_F + \hbar \omega_p} \rho(E'_k - \hbar \omega_p) \rho(E') dE' )^{-1}$$

Dans l'approximation des électrons libres :  $\rho(E'_k) = a \sqrt{E'_k}$

ainsi :

$$S(E_k') = \frac{P \sqrt{E_k'} \sqrt{E_k' - \frac{1}{2} \hbar \omega_p}}{\int_{\frac{1}{2} \hbar \omega_p}^{E_F + \frac{1}{2} \hbar \omega_p} \sqrt{E_k'} \sqrt{E_k' - \frac{1}{2} \hbar \omega_p} dE_k'} \quad (I48)$$

L'intégrale du dénominateur est facile à évaluer et vaut :

$$\frac{I}{2} \left[ \left( E_F + \frac{\hbar \omega_p}{2} \right) \sqrt{E_F (E_F + \hbar \omega_p)} - \left( \frac{\hbar \omega_p}{2} \right)^2 \log \frac{\frac{\hbar \omega_p}{2}}{E_F + \frac{\hbar \omega_p}{2} + \sqrt{E_F (E_F + \hbar \omega_p)}} \right]$$

Connaissant  $S(E_k')$  nous pouvons alors utiliser l'expression

de PUFF. La courbe représentant la variation du rendement électronique secondaire avec l'énergie primaire a été dessinée sur la figure 9.

Bien qu'amélioré, l'accord entre les courbes 5 représentant la somme des 3 contributions évaluées précédemment et 6 représentant les résultats expérimentaux de BRONSHTEJN et FRAJMAN [18] reste médiocre surtout si l'on considère plus particulièrement les pentes. En particulier, il apparaît que la théorie donne des résultats nettement trop grands aux faibles énergies primaires. La raison de ce désaccord réside dans la forte dépendance de l'énergie primaire des contributions collectives.

- 1: Approximation des électrons libres. Excitations individuelles
- 2: Amortissement des plasmons, création d'une paire
- 3: Amortissement des plasmons, 2 processus
- 4: Somme des courbes 1 et 2
- 5: Somme des courbes 1 et 3
- 6: Résultats expérimentaux d'après BRONSHTEIN et FRAJMAN [18]

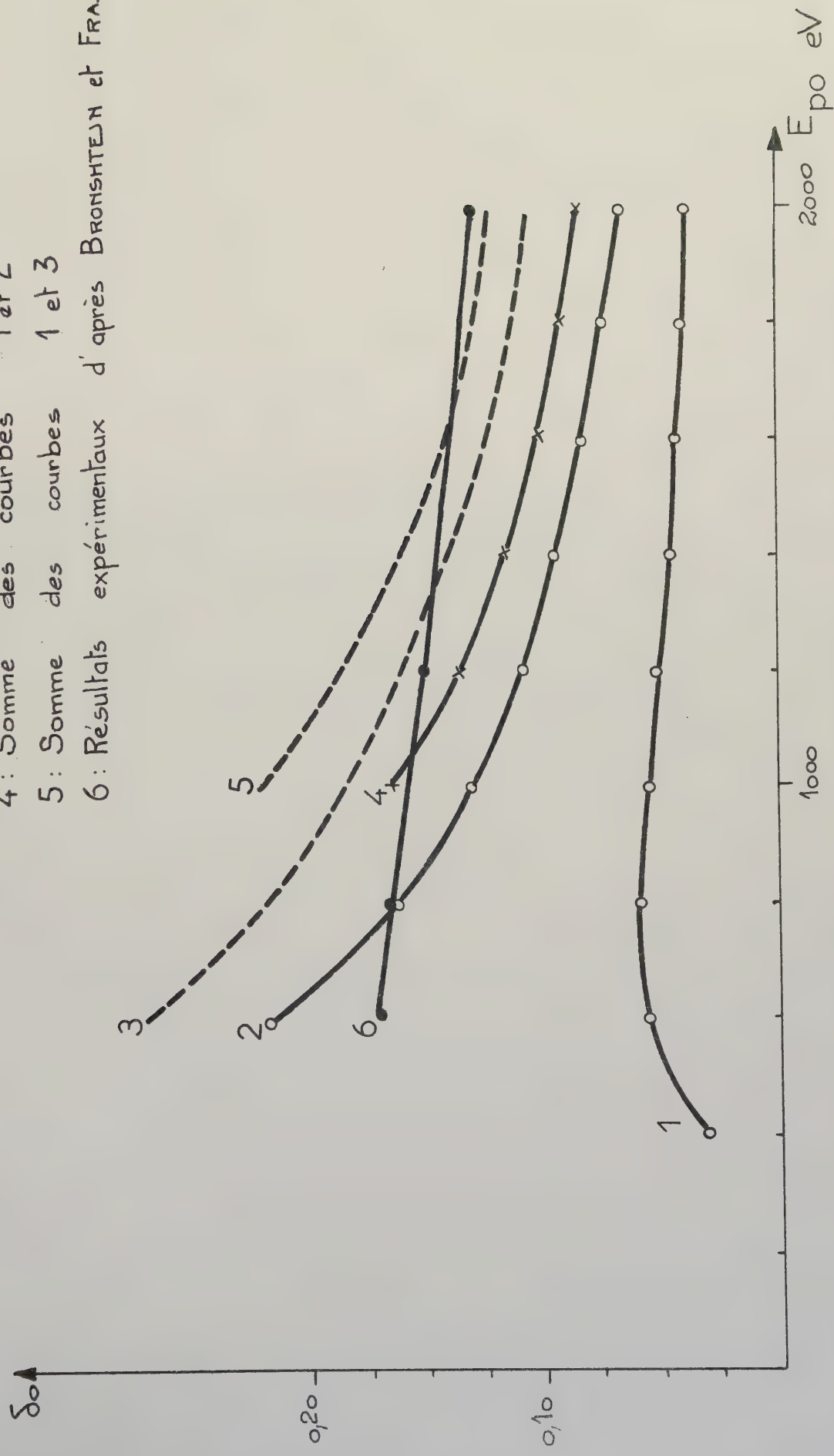


Figure 9: - RESULTATS THEORIQUES ET EXPERIMENTAUX DE L'EFFICACITE  
DES ELECTRONS DIFFUSANTS POUR L'ALUMINIUM -



CHAPITRE 5

-:-

TRANSITIONS OPTIQUES ET TRANSITIONS ELECTRONIQUES  
ENTRE - BANDES

-:-



## CHAPITRE 5

-:-

### TRANSITIONS OPTIQUES ET TRANSITIONS ELECTRONIQUES ENTRE-BANDES

-:-

|                                                                                       |     |
|---------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1/ TRANSITIONS OPTIQUES ET TRANSITIONS ELECTRONIQUES ENTRE-BANDES...                  | 122 |
| 2/ LIAISON AVEC LA THEORIE DE FROHLICH DE L'EMISSION ELECTRONIQUE<br>SECONDAIRE ..... | 138 |
| 3/ RESULTATS .....                                                                    | 140 |

-:-

### Résumé du chapitre 5

Dans une première partie, nous appliquons les résultats généraux du chapitre précédent au cas particulier du développement des fonctions de BLOCH sur la base des ondes planes orthogonalisées. Ensuite, nous procédons à l'établissement du parallélisme entre les transitions optiques et les transitions électroniques. Il est ainsi possible de relier le nombre des électrons secondaires créés avec l'énergie  $E$  en fonction des parties imaginaire et réelle de la constante diélectrique. La liaison avec la théorie de FROHLICH est alors facile à établir. Finalement nous présentons les résultats obtenus en appliquant la méthode précédente aux métaux nobles.

Dans le chapitre 4 nous avons défini la probabilité par unité de temps avec laquelle s'effectue la transition d'un électron du solide de l'état décrit par le vecteur d'onde  $\vec{k}$  vers l'état décrit par le vecteur d'onde  $\vec{k}'$ , sous l'action d'un électron qui, simultanément, passe de l'état  $\vec{K}$  à l'état  $\vec{K}'$ . Nous avons représenté chaque électron par une fonction d'onde du type de BLOCH. Nous avons ensuite appliqué la méthode au cas particulier des électrons libres.

Dans le premier paragraphe de ce nouveau chapitre nous formulons le même calcul dans le cas où les électrons sont représentés par des combinaisons linéaires d'ondes planes orthogonalisées.

$$\vec{K} = (\Omega)^{-1/2} \sum_{\vec{G}_K} a_{G_K}(\vec{K}) \exp [i (\vec{K} + \vec{G}_K) \cdot \vec{R}] \quad (I49)$$

Ainsi:

$$\langle \vec{K}' | \exp (-i \vec{q} \cdot \vec{R}) | \vec{K} \rangle = (\Omega)^{-1} \sum_{\vec{G}_K} \sum_{\vec{G}_{K'}} a_{G_K}(\vec{K}) a_{G_{K'}}^*(\vec{K}') \delta(\vec{q} - \vec{K} - \vec{G}_K + \vec{K}' + \vec{G}_{K'}) \quad (I50)$$

et:

$$\langle \vec{k}' | \sum_{\vec{q}} \frac{4 \pi e^2}{q^2} \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} | \vec{k} \rangle = \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}_K} \sum_{\vec{G}_{K'}} a_{G_K}(\vec{k}) a_{G_{K'}}^*(\vec{k}') \frac{4 \pi e^2}{q^2 \epsilon(\vec{q}, \omega)} \delta(\vec{q} + \vec{k} + \vec{G}_K - \vec{k}' - \vec{G}_{K'}) \quad (I51)$$

Nous obtenons ainsi:

$$V_{k',k}^{\circ} = \Omega^{-2} \sum_{\vec{G}_K} \sum_{\vec{G}_{K'}} \sum_{\vec{G}_k} a_{G_K}(\vec{k}) a_{G_{K'}}^*(\vec{k}') a_{G_k}(\vec{k}) a_{G_k}^*(\vec{k}') \frac{4 \pi e^2}{q^2} \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \quad (I52)$$

Dans cette expression:  $\vec{q} = \vec{k} + \vec{G}_K - \vec{k}' - \vec{G}_{K'}$ ,

et  $\vec{k}$  est donné par la relation:

$$\vec{q} = \vec{k} + \vec{G}_K - \vec{k}' - \vec{G}_{K'} = \vec{k}' + \vec{G}_k - \vec{k} - \vec{G}_k \quad (I53)$$

que l'on peut écrire:

$$\vec{k} + \vec{k} = \vec{k}' + \vec{k}' + \vec{G}_0 \quad (I54)$$

$$\text{avec: } \vec{G}_0 = \vec{G}_k + \vec{G}_{K'} - \vec{G}_K - \vec{G}_k \quad (I55)$$

Cette approximation a été utilisée par KANE [I88] pour calculer le taux de création de paires dans le Silicium. L'intégration sur les états initiaux et finals à l'aide de la méthode de MONTE-CARLO conduit à des résultats qui peuvent être très bien approchés par une méthode beaucoup plus simple et reposant sur

l'hypothèse de la répartition désordonnée de l'état du trou. Des corrections importantes, par rapport à l'approximation des électrons libres interviennent au voisinage du seuil entre-bandes, par contre aux énergies primaires plus élevées les résultats obtenus dans l'une et l'autre approximation tendent à se confondre. KANE a noté que l'utilisation qu'il fait de l'approximation " $\vec{k}$  aléatoire" peut s'appliquer aux métaux normaux pour lesquels l'approximation des électrons quasi-libres est acceptable, mais non aux états dérivés des niveaux  $d$  en raison de leur grande dispersion dans l'espace  $\vec{k}$ .

En utilisant les résultats de MELNGAILIS [189], nous avons, en collaboration avec Mlle OFFRET [190], évalué les éléments de la matrice  $\exp(i \vec{q} \cdot \vec{r})$  entre 2 états  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$ , le premier étant occupé et le second libre. Les résultats que nous avons obtenus à l'intérieur de la première zone de BRILLOUIN ne sont pas très éloignés de ceux des électrons libres, sauf au voisinage de la surface de cette zone. Il en résulte que les seuls processus normaux ne permettent pas d'expliquer l'EES.

# 1°/ TRANSITIONS OPTIQUES ET TRANSITIONS ELECTRONIQUES ENTRE- BANDES

En raison de l'analogie dans les formulations des processus d'absorption optiques et électroniques par transitions entre-bandes, il est possible d'établir une liaison entre la conductibilité optique et l'émission électronique secondaire. Cette liaison a été réalisée initialement par BAROODY [208] en s'appuyant sur l'hypothèse de l'interaction non écrantée des électrons primaires et des électrons de conduction. Nous avons repris le travail de BAROODY en nous libérant de son hypothèse et en étendant le calcul à l'ensemble des transitions entre-bandes. Nous montrons aussi que le résultat obtenu est équivalent à celui de FRÖHLICH [209] formulé à l'aide de la fonction perte d'énergie.

Nous résumons dans ce qui suit le calcul des probabilités des transitions optiques, le détail du calcul pouvant s'obtenir à partir des articles de BUTCHER [191] et de BASSANI [192].

L'Hamiltonien total représentant l'énergie d'un électron du cristal en présence d'un champ électromagnétique s'écrit dans l'ap-

proximation monoélectronique:

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\vec{r}) \quad (I56)$$

où  $V(\vec{r})$  est le potentiel cristallin au sens de HARTREE-FOCK.

Le potentiel scalaire du champ électromagnétique a été pris égal à zéro sans aucune perte de généralité. Si l'on néglige les termes d'ordre supérieur à 1 l'opérateur perturbation dépendant du temps s'écrit :

$$H'(\vec{r}, t) = \frac{e}{m \cdot c} \vec{A} \cdot \vec{p} \quad (I57)$$

où l'opérateur  $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$  et en supposant que  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$

La probabilité suivant laquelle un électron dans l'état défini par l'indice de bande  $a$  et par le vecteur d'onde  $\vec{k}$  effectue une transition vers un état  $(b, \vec{k}')$  est obtenu par un calcul analogue à celui du chapitre 4 et vaut:

$$|b_{kk'}^{(I)}(t)|^2 = \left(\frac{e}{m \cdot c}\right)^2 A_0^2 |\vec{e} \cdot \vec{M}_{ab}|^2 \frac{4 \sin^2\left[(\omega_{bk', ak} - \omega) \frac{t}{2}\right]}{(\omega_{bk', ak} - \omega)^2} \quad (I58)$$

où  $A_0$  est l'amplitude du potentiel vecteur et:

$$\vec{e} \cdot \vec{M}_{ab} = e \int_{\Omega_\infty} d\vec{r} \exp(-i \vec{k}' \cdot \vec{r}) u_b^*(\vec{k}', \vec{r}) \vec{\nabla} \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) u_a(\vec{k}, \vec{r}) \quad (I59)$$

Si les fonctions modulatrices  $u_b^*(\vec{k}', \vec{r})$  et  $u_a(\vec{k}, \vec{r})$  satisfont les conditions de périodicité requises habituellement dans la théorie de BLOCH, il existe entre les vecteurs d'onde des électrons et celui,  $\vec{\gamma}$ , du photon la relation:

$$\vec{k} - \vec{k}' + \vec{\gamma} = \vec{h} \quad (I60)$$

où  $\vec{h}$  est un vecteur du réseau réciproque. Le module de  $\vec{\gamma}$  étant négligeable devant ceux des vecteurs  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$  et ceux-ci étant restreints à la première zone de BRILLOUIN nous avons:

$$\vec{k} - \vec{k}' \approx 0 \quad (I6I)$$

Cette condition semble bien vérifiée dans les transitions optiques ne mettant en jeu que d'assez faibles énergies et s'effectuant à partir de niveaux déduits des états atomiques s-p. Par contre il existe de nombreuses expériences où la conservation du vecteur d'onde ne semble pas être une règle de sélection importante. Citons les études de photoémission de SPICER et de ses Collaborateurs [210-213] et les travaux concernant les propriétés optiques des semi-conducteurs mettant en jeu d'assez grandes énergies [214-215]. La rupture de la condition de conservation du vecteur d'onde se manifeste lorsque la périodicité de la fonction modulatrice de BLOCH ne semble pas assurée en toute certitude.

C'est la raison pour laquelle elle apparaît lorsque l'état électronique initial est fortement localisé dans l'espace où lorsque l'état final possède un comportement proche de celui d'un électron libre. En pratique les résultats optiques et de photoémission peuvent s'interpréter à l'aide de transitions ne dépendant que de densités apparentes ou optiques des états initiaux et finals. SPIGER [212] a posé la question de savoir si ces densités optiques pouvaient se déduire des densités obtenues par les calculs de bandes du solide quand celui-ci est dans son état fondamental. EASTMAN et KROLIKOWSKI [217] ont trouvé que cela était possible pour les bandes d du Cuivre et du Nickel. Ils ont obtenu aussi un bon accord entre les densités d'états optiques du cuivre et du nickel cette dernière se déduisant de la première avec un modèle de bande rigide et un dédoublement d'échange de 0,4 eV. Ils ont observé la grande sensibilité aux conditions superficielles du pic, jusqu'alors assez mal expliqué, situé à 4,5 eV au dessous du niveau de FERMI. Ce pic avait été interprété par PHILLIPS [218] comme résultant d'une résonance de bande d et relié par lui à un renflement dans la courbe  $\epsilon_2(\omega)$  obtenue par BEAGLEHOLE [194] dans le cuivre. Les ex-

périences de BEAGLEHOLE avaient été réalisées dans des conditions telles que la contamination de surface ne pouvait expliquer cette structure. Il semble maintenant que celle-ci résulte de l'existence d'un pic dans la structure de bande monoélectronique comme montré par MUELLER [219] pour Cu et confirmé par LEWIS et LEE [220] dans l'argent. L'interprétation par résonance à N corps dans la bande  $d$  ne semble pas avoir reçu de confirmation récemment, bien au contraire. Ceci ne signifie pas qu'il n'y ait aucun effet à N corps dans la bande  $d$  mais simplement que ces effets ne perturbent pas de façon considérable la densité des états. Par contre la non conservation du vecteur d'onde demeure nécessaire pour interpréter les résultats de EASTMAN et KROLIKOWSKI. Il semblerait qu'il y ait autour du trou  $d$  une source de  $\vec{k}$  rendant sans effet la conservation de ce vecteur. FRIEDEL a suggéré à SPICER que la variation de  $\vec{k}$  de l'électron effectuant la transition pouvait être égale à la somme des variations de  $\vec{k}$  des différents électrons qui, situés au voisinage du trou  $d$ , subissent une relaxation.

Si nous retournons à l'équation (159) nous pouvons compte-tenu des 3 conditions suivantes qui semblent justifiées expérimentalement:

1) non conservation de  $\vec{k}$

2) comportement individuel en ce qui concerne l'énergie

3) constance de l'élément de matrice

ne pas tenir compte des conditions (I60) et (I61).

Il est alors intéressant de rapprocher les expressions de

$|b_{kk'}^{(I)}(t)|^2$  (éq. I58) et  $|a_{kk'}^{(I)}(t)|^2$  (éq. 95 du chap. 4) que

nous répétons ci-dessous

$$|a_{kk'}^{(I)}(t)|^2 = \frac{|V_{k',k}|^2}{\hbar^2} \frac{4 \sin^2 \left[ (\omega_{k',k} - \omega) \frac{t}{2} \right]}{(\omega_{k',k} - \omega)^2} \quad (95)$$

A la limite des  $t$  grands les expressions de  $|a_{kk'}^{(I)}(t)|^2$

et  $|b_{kk'}^{(I)}(t)|^2$  deviennent linéaires en  $t$  car à cette limite

$\frac{\sin^2 \propto t}{t \propto t^2}$  a les propriétés de la fonction  $\delta$  de DIRAC. En consé-

quence:

$$|b_{kk'}^{(I)}(t)|^2 = \left(\frac{e}{m c}\right)^2 A_0^2 |e M_{ab}|^2 2 \pi \hbar \delta(E_{k'} - E_k - \hbar \omega) \quad (I62)$$

et

$$|a_{kk'}^{(I)}(t)|^2 = \frac{2 \pi}{\hbar} |V_{k',k}(t)|^2 \delta(E_{k'} - E_k - \hbar \omega) \quad (I63)$$

Pour obtenir le nombre de transitions par unité de temps et par

unité de volume nous devons sommer sur tous les états possibles.

Dans le cas des transitions optiques nous avons à intégrer en  $\vec{k}$  et à faire la sommation sur les indices de bandes. En considérant chaque paire de bandes séparément, l'une étant occupée et l'autre vide, nous obtenons :

$$w^{\text{opt}}(\omega) = 4\pi \hbar \left(\frac{e}{mc}\right)^2 A_0^2 \int_{\text{ZB}} \frac{d\vec{k}}{8\pi^3} |\vec{e} \cdot \vec{M}_{ab}|^2 \delta(E_k, -E_k - \hbar\omega) \quad (\text{I64})$$

Dans le cas des transitions électroniques, pour obtenir la probabilité de transition par unité de temps rapportée à un flux primaire unité et correspondant à un électron primaire diffusé dans l'angle solide  $d\Omega'$  nous devons diviser l'expression (I63) par  $\hbar K/m$  et intégrer à  $|\vec{K}'|$  constant en tenant compte de la densité des états  $I/(8\pi^3)$ . Ainsi:

$$P d\Omega' = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{m}{\hbar K} \frac{16\pi^2 e^4}{q^4 |\epsilon(\vec{q}, \omega)|^2} \frac{I}{8\pi^3} |\vec{I}|^2 \int K'^2 dK' d\Omega' \quad (\text{I65})$$

$$\delta(E_k, -E_k - \hbar\omega) \delta(E_{k'} + E_k - E_{k'} - E_{k'})$$

L'intégration en  $K'$  est réalisée immédiatement à l'aide de la seconde fonction  $\delta$  qui représente la conservation de l'énergie et en tenant compte de  $K' dK' = \frac{m}{\hbar^2} dE_{k'}$ , si l'on assimile l'électron primaire à un électron libre. Nous obtenons:

$$P d\Omega' = \frac{4 m^2 e^4}{\hbar^4 q^4} \frac{|I|^2}{|\epsilon(\vec{q}, \omega)|^2} \frac{K'}{K} d\Omega' \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega) \quad (I66)$$

avec:

$$I = \int \psi_k \psi_{k'}^* \exp(i \vec{q} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (I67)$$

Il est possible de transformer l'expression de I en:

$$I = \frac{\hbar \vec{q}}{E} \int \vec{j} \cdot \exp(i \vec{q} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (I68)$$

$$\text{avec } \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi_{k'}^* \vec{\nabla} \psi_k - \psi_k \vec{\nabla} \psi_{k'}^*) \quad (I69)$$

(cf. SOKOLOFF [I93]) et  $E = E(\vec{k}') - E(\vec{k})$

Cette relation est obtenue si  $\psi_k$  et  $\psi_{k'}$  sont deux solutions de la même équation de SCHRODINGER. La justification de cette hypothèse doit être cherchée dans le travail expérimental de EASTMAN et KROLIOWSKI qui ont montré que les densités d'états optiques étaient en excellent accord avec les densités calculées pour l'état fondamental du système, ceci indique que la création d'un trou laisse, du point de vue énergétique, intacte la notion d'état monoélectronique et ne modifie pas de façon décisive les niveaux d'énergie.

Par ailleurs, la constante diélectrique mesurée dans les expériences d'optique n'est pas, lorsque les transitions non-directes pré-

dominant, la constante diélectrique statique  $\epsilon(0, \omega)$  (qui est obtenue dans le cas où seules les transitions directes interviennent) mais une constante diélectrique dynamique résultant de la relaxation des électrons autour du trou créé par la transition optique.

Si nous nous restreignons aux métaux cubiques nous pouvons à la limite  $\vec{q} = 0$  confondre constante diélectrique transversale et constante diélectrique longitudinale. Nous admettons que dans le cas où les transitions non-directes sont dominantes que les deux constantes diélectriques peuvent être confondues puisqu'il n'y a pas pour un cristal isotrope de différence entre une transition électronique et une transition optique avec apport de  $\vec{q}$  par une source autre que les électrons subissant le transfert d'énergie.

Nous remplaçons ainsi la constante diélectrique  $\epsilon(\vec{q}, \omega)$  par la valeur de  $\epsilon(0, \omega)$  telle qu'elle est obtenue expérimentalement c'est-à-dire avec son contenu en transitions non-directes.

Nous obtenons ainsi:

$$P d\Omega' = \frac{4 e^4 K'}{q^2 |\epsilon(0, \omega)|^2 K} \frac{|\vec{e} \cdot \vec{M}_{\vec{k}, \vec{k}'}|^2}{E^2} d\Omega' \delta(E - \hbar\omega) \quad (I70)$$

Nous devons noter que par analogie avec les transitions optiques nous avons admis que les transitions électroniques sont non-

directes c  d que  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ . La validit   du remplacement de

$\epsilon(\vec{q}, \omega)$  par  $\epsilon(0, \omega)$  r  sultant de l'indiff  rence de la

r  ponse du solide au vecteur d'onde de la source d'excitation.

En d'autres termes ceci r  sulte de la constance de l'  l  ment de matrice intervenant dans les r  ponses optiques et, nous le supposons,   lectroniques.

Le remplacement de  $|\vec{q} \cdot \vec{M}_{k',k}|^2$  par  $q^2 |\vec{e} \cdot \vec{M}_{k',k}|^2$  a   t   justifi   par BAROODY pour les cristaux cubiques.

Nous pouvons r  aliser l'int  gration sur  $\Omega'$     l'aide de (cf. BAROODY [208]) :

$$d\Omega' = \frac{q \, dq \, d\phi}{K^2} \quad (I71)$$

et tenant compte de la quasi-  galit  :  $K' = K$  nous avons:

$$\int_{\Omega'} P \, d\Omega' = \frac{3\pi e^4}{|\epsilon(\omega)|^2} \frac{I}{E^2} |\vec{e} \cdot \vec{M}_{k',k}|^2 \text{Log}\left(\frac{2E_p}{E}\right) \cdot \frac{I}{K^2} \delta(E - n\omega) \quad (I72)$$

l'int  gration a   t   r  alis  e de  $q = q_{\min}$  jusqu'    $q_{\max} = q_{\min}$ .

$(2E_p / E)$ . Nous pouvons maintenant int  grer sur tous les   tats

initiaux pour obtenir le nombre d'  lectrons excit  s dans l'  tat

d'  nergie  $E'$ .

$$\frac{dQ}{dE'}(E') = \frac{\hbar^2}{2m E_p} \frac{e^4}{|\epsilon(\omega)|^2} \frac{1}{E'^2} \log \frac{2E_p}{E'} \cdot \frac{2}{\pi^2} \int |\vec{e} \cdot \vec{M}_{k,k}|^2 d\vec{k} \delta(E' - \hbar\omega) \quad (I73)$$

La liaison avec l'expression de  $W^{\text{opt}}$  est ainsi réalisée.

Nous pouvons transformer l'expression de  $W^{\text{opt}}$  de façon à obtenir la partie imaginaire de la constante diélectrique en procédant de la manière suivante:

La densité moyenne de l'énergie dans le milieu peut s'obtenir à partir du potentiel vecteur à l'aide de l'expression:

$$u = \frac{\epsilon A_0^2 \omega^2}{2 \pi c^2} \quad (I74)$$

où  $\epsilon$  est la constante diélectrique réelle. La radiation dans le

milieu se propage avec la vitesse  $v = \frac{c}{n} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon}}$

ainsi en posant  $u = \hbar\omega$  nous avons:

$$A_0^2 = \frac{2 \pi \hbar c^2}{\epsilon \omega} \quad (I75)$$

Avec cette expression pour  $A_0$ , la relation (I64) devient la pro-

babilité par unité de temps pour qu'un photon soit absorbé. Le coefficient d'absorption est par définition l'énergie absorbée par unité

de temps dans le volume unité divisée par le flux d'énergie. Rappelant que le flux est le produit de la densité d'énergie par la vitesse de propagation nous obtenons:

$$\alpha(\omega) = 8 \pi^2 \hbar^2 \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{I}{n c \omega} \int \frac{d\vec{k}}{8 \pi^3} |\vec{e} \cdot \vec{M}_{\vec{k}, \vec{k}}|^2 \delta(E_{\vec{k}}, -E_{\vec{k}} - \hbar \omega) \quad (I76)$$

et de là  $\epsilon_2(\omega)$  par:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{n c \alpha(\omega)}{\omega} \quad (I77)$$

Nous en déduisons:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\hbar^2}{\pi} \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{I}{\omega^2} \int d\vec{k} |\vec{e} \cdot \vec{M}_{\vec{k}, \vec{k}}|^2 \delta(E_{\vec{k}}, -E_{\vec{k}} - \hbar \omega) \quad (I78)$$

et:

$$\frac{dQ(E)}{dE} = \frac{I}{2 \pi a_0 E_p} \frac{\epsilon_2(\omega)}{|\epsilon(\omega)|^2} \text{Log} \frac{2 E_p}{E} \quad (I79)$$

Avant d'établir la liaison avec la théorie de l'émission électronique secondaire de FROHLICH nous aimerions revenir sur les différentes hypothèses de notre calcul. Ces hypothèses sont les suivantes:

1°) L'électron d a un comportement individuel des points de vue densité des états et énergie et correspondant à un modèle de bandes du schéma itinérant. Ce point a été précédemment discuté et repose sur les travaux de MUELLER, LEWIS et LEE et principalement de EASTMAN et KROLIKOWSKI. Pourtant comme établi par FRIEDEL [197] l'écrantage du trou d par les électrons de conduction conduit à la mise en défaut du théorème de KOOPMANS. La correction d'énergie correspondant à l'écrantage a été évaluée par HAGA et OKAMOTO [198 - 199] et peut s'élever jusqu'à 0,7 eV. Nous admettons que l'effet de cet écrantage ne remet pas en cause le modèle de bandes des électrons d, ceci aussi bien à la lumière des travaux de EASTMAN et KROLIKOWSKI qu'à ceux de HAGA et OKAMOTO qui ont montré que le pic de conductibilité optique dans Cu et Ag pouvait être retrouvé dans sa partie faible énergie par un modèle de transitions directes entre la bande d et la bande de conduction.

En quelque sorte et il nous semble que HAGA et OKAMOTO émettent implicitement cette hypothèse, l'effet de l'écrantage serait analogue à celui d'un déplacement global des bandes d.

2°) La conservation du vecteur  $\vec{k}$  n'est pas une règle de sélection dans les transitions à partir des niveaux d. La différence étant fournie par une source qui à la lumière des travaux de HAGA et OKAMOTO et comme suggéré par FRIEDEL à SPICER pourrait être cherchée dans les électrons qui se relaxent autour du trou d.

La réelle justification de cette hypothèse se trouve dans les résultats expérimentaux des études de photoémission de SPICER et aussi de EASTMAN et KROLIKOWSKI. Notons encore que KANE [188] a évalué, pour le Silicium, les probabilités de transitions monoélectroniques induites par un électron excité, entre la bande de valence et la bande de conduction. Il a obtenu les mêmes valeurs soit en utilisant la conservation de  $\vec{k}$  soit en l'ignorant totalement. Il explique ce résultat par le fait que dans sa première méthode de calcul les vecteurs  $\vec{k}, \vec{k}'$  et  $\vec{k}''$  (avec nos notations) étant répartis dans le secteur élémentaire de la 1<sup>ère</sup> zone de BRILLOUIN (1/48 ème) il leur correspond  $48^3$  valeurs différentes de  $\vec{k}$  et cubiquement non-équivalentes à l'intérieur de la zone. Ces points étant répar-

tis plus ou moins à l'intérieur de la zone assurent une pondération analogue à la non-conservation de  $\vec{k}$ . La difficulté d'utilisation de la méthode de KANE dans le cas des métaux ayant des électrons d provient de l'intégration en  $\vec{k}$  et de la sommation sur les indices de bandes en raison de la grande dispersion en  $\vec{k}$  des fonctions d'onde des électrons d. Cette difficulté est évitée ici par l'utilisation de la constante diélectrique expérimentale.

3°) Les probabilités de transitions optiques ou électroniques non directes sont évaluées par la méthode des perturbations dépendantes du temps au premier ordre, car, comme noté par SPICER [216]

Les transitions optiques non-directes sont beaucoup plus importantes que les transitions optiques assistées par phonons, lesquelles se calculent au second ordre. Notons encore que les transitions optiques non-directes sont indépendantes de la température ce qui suggère qu'elles ne sont pas assimilables aux transitions assistées par phonons.

4°) Nous avons considéré que la constante diélectrique dynamique électronique était égale à la constante diélectrique optique obtenue expérimentalement, ce que nous avons justifié par l'indé-

pendance de la réponse optique du système relativement au vecteur d'onde de la source d'excitation puisque cette réponse ne suppose pas la conservation du vecteur  $\vec{k}$ . Nous ne pouvons la justifier par ailleurs qu'en nous limitant aux seuls métaux cubiques.

5°) Rappelons que la théorie du transport suppose entre autres choses que l'électron excité se comporte comme un électron libre.

Finalement nous voudrions noter que la liaison établie ici entre les transitions optiques et les transitions électroniques conduit formellement au même résultat que si nous avions supposer que les transitions optiques étaient directes et que les transitions électroniques s'effectuaient avec un apport d'impulsion de l'électron primaire si faible qu'il serait possible de le négliger devant les apports du réseau et devant les valeurs de  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$ .

## 2°/ LIAISON AVEC LA THEORIE DE FRÖHLICH DE L'EMISSION ELECTRONIQUE

## SECONDAIRE.

FRÖHLICH [209] a relié le taux de création des électrons secondaires à la perte d'énergie du faisceau primaire, laquelle s'exprime par la relation:

$$-\frac{dE_p}{dx} = \frac{4 e^2}{\pi v_p^2} \int_0^\infty \omega \frac{n(\omega) \kappa(\omega)}{|\epsilon(\omega)|^2} \cdot x K_0(x) K_I(x) d\omega \quad (I80)$$

$$\text{où } E_p = \frac{1}{2} m v_p^2 \quad \epsilon(\omega) = [n(\omega) + i \kappa(\omega)]^2 \quad (I81)$$

$$\text{et } x = \frac{r_{\min} \omega}{v_p}$$

$K_0(x)$  et  $K_I(x)$  sont les fonctions de BESSEL modifiées d'ordre 0

et I,  $r_{\min}$  est la valeur minimale que peut prendre le paramètre d'impact  $r$ . Ce paramètre d'impact est défini comme étant la

distance entre l'électron qui va subir l'excitation et la trajectoire supposée rectiligne de l'électron primaire. FRÖHLICH admet

que  $r_{\min}$  doit être de l'ordre de grandeur de la distance interatomique.

Nous pouvons dans la relation (I80) remplacer  $2 n(\omega) \kappa(\omega)$

par  $\epsilon_2(\omega)$ , obtenant ainsi:

$$-\frac{dE_p}{dx} = \frac{2 e^2}{\pi v_p^2} \int_0^\infty \omega \frac{\epsilon_2(\omega)}{|\epsilon(\omega)|^2} \cdot \frac{r_{\min} \omega}{v_p} K_0(x) K_I(x) d\omega \quad (I82)$$

Si  $x$  est petit, et, en pratique pour nous, cette condition est assez bien satisfaite, il est possible de remplacer  $K_0(x)$  par  $-\text{Log } x$  et  $K_I(x)$  par  $1/x$ . Il vient:

$$-\frac{dE_p}{dx} = -\frac{2e^2}{\pi v_p^2} \int_0^\infty \frac{\epsilon_2(\omega)}{|\epsilon(\omega)|^2} \text{Log } x \, d\omega \quad (I83)$$

Le nombre d'électrons créés par un transfert d'énergie s'obtient en divisant le coefficient de  $d(\hbar\omega)$  par  $(-\hbar\omega)$ . En tenant compte de  $E_p = \frac{I}{2} m v_p^2$  et de  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$  nous avons:

$$\frac{dQ}{dE} = \frac{I}{2\pi a_0 E_p} \frac{\epsilon_2(\omega)}{|\epsilon(\omega)|^2} \text{Log } x \quad (I84)$$

Ce résultat peut être rapproché de celui obtenu dans le paragraphe précédent

$$\frac{dQ}{dE} = \frac{I}{2\pi a_0 E_p} \frac{\epsilon_2(\omega)}{|\epsilon(\omega)|^2} \text{Log } \frac{2 E_p}{E} \quad (I85)$$

pour cela il suffit d'identifier  $\frac{I}{x^2} = \frac{v_p^2}{r_{\min}^2 \omega^2}$  avec  $\frac{2 E_p}{E}$

ce qui nous conduit à prendre:

$$r_{\min} = a_0 \sqrt{\frac{2E_R}{E}} \quad \text{avec} \quad E_R = \frac{e^2}{2a_0}$$

Une valeur acceptable pour  $E$  est, par exemple 4 eV. Cette valeur équivaut à prendre  $r_{\min} = 1,4 \text{ \AA}$  c'est-à-dire une valeur tout à fait comparable avec celles préconisées par FRÖHLICH.

3/ RESULTATS

Nous avons représenté sur la figure 10 les variations de l'efficacité électronique secondaire en fonction de l'énergie primaire pour différentes valeurs du paramètre d'impact minimal  $r_{\min}$ . L'allure générale des courbes est bien celle obtenue expérimentalement. La valeur du paramètre d'impact a une influence importante sur les valeurs de  $\delta_0$ .

La figure 11 présente les valeurs théoriques et expérimentales du coefficient  $\delta_0$  pour les paramètres suivants :

$$\phi = W - E_F = 4,1 \text{ eV} \quad r_{\min} = 1,4 \text{ \AA}$$

et un lpm évalué de façon empirique par un compromis entre les valeurs expérimentales et les valeurs théoriques calculées à l'aide des expressions de RITCHIE et ASHLEY d'une part et de GOLDBERGER [201] d'autre part. Les valeurs calculées sont largement supérieures aux valeurs expérimentales. Ceci peut être dû à la grandeur excessive attribuée au lpm et résultant des deux causes suivantes :

- les expressions théoriques ont été établies dans l'appro-

ximation des électrons libres. Elles négligent donc les interactions des électrons secondaires avec les électrons d des noyaux. (\*)

- ADLER [202] a montré que la planéité de la surface de FERMI du cuivre surestimait la valeur du lpm calculée.

Nous avons alors repris les calculs précédents en utilisant une valeur constante du lpm que nous avons choisie parce qu'elle s'accorde avec les valeurs calculées par les méthodes indiquées précédemment pour des énergies de l'ordre de 20 eV au dessus du niveau de FERMI. En prenant encore pour paramètre d'impact la valeur de  $1,4 \text{ \AA}$ , nous obtenons un bon accord (cf. fig. I2) entre les résultats expérimentaux et les valeurs calculées. L'explication de ce meilleur accord réside dans le fait qu'en prenant un lpm constant nous l'avons surestimé aux grandes énergies et aux faibles valeurs de  $d\delta_0/dE_S$  et sousestimé dans le cas contraire. L'effet global est une réduction de  $\delta_0$ .

---

(\*) Nous remercions Mr. le Professeur FRIEDEL d'avoir attiré notre attention sur ce point comme sur bien d'autres.

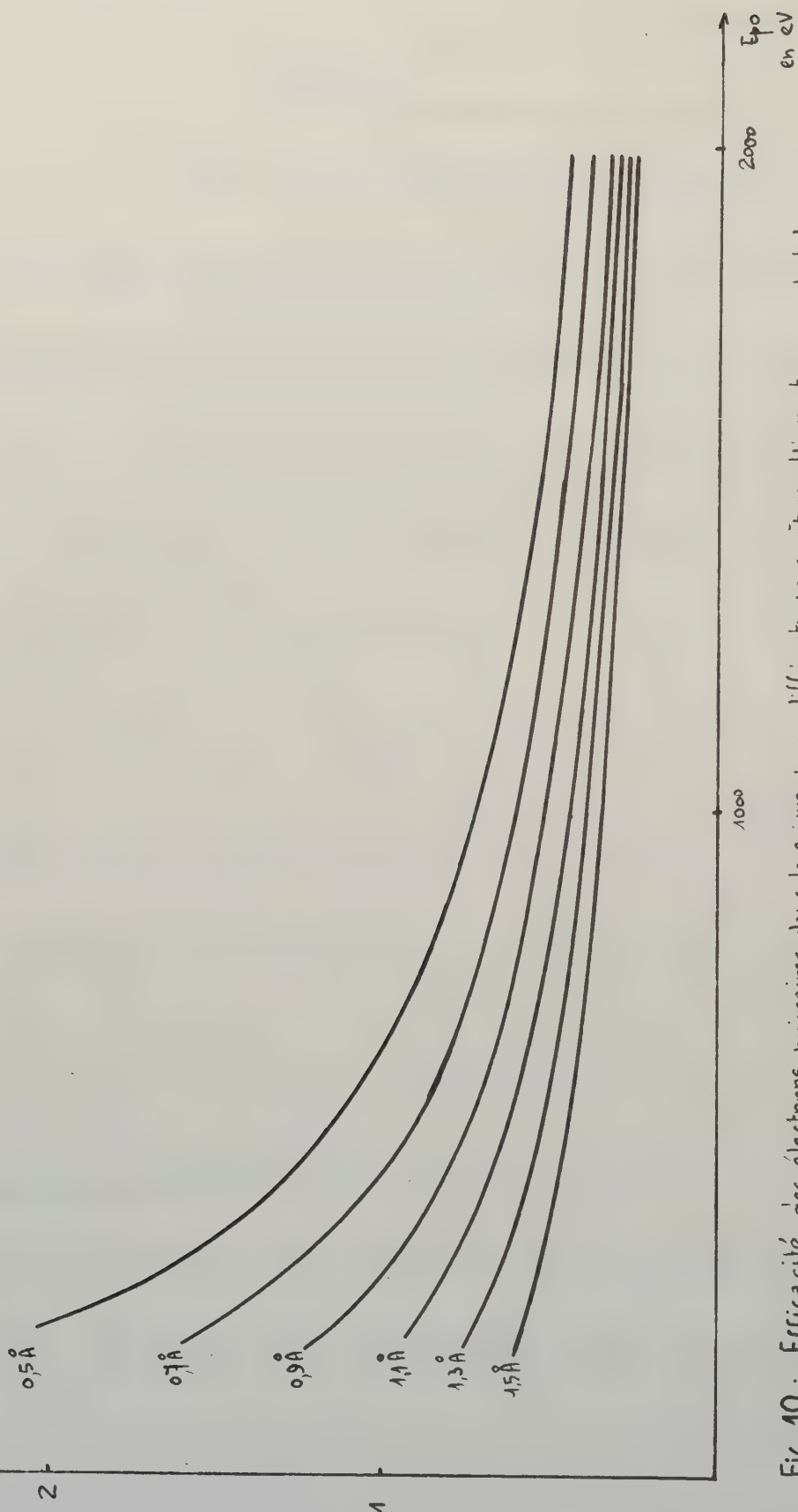
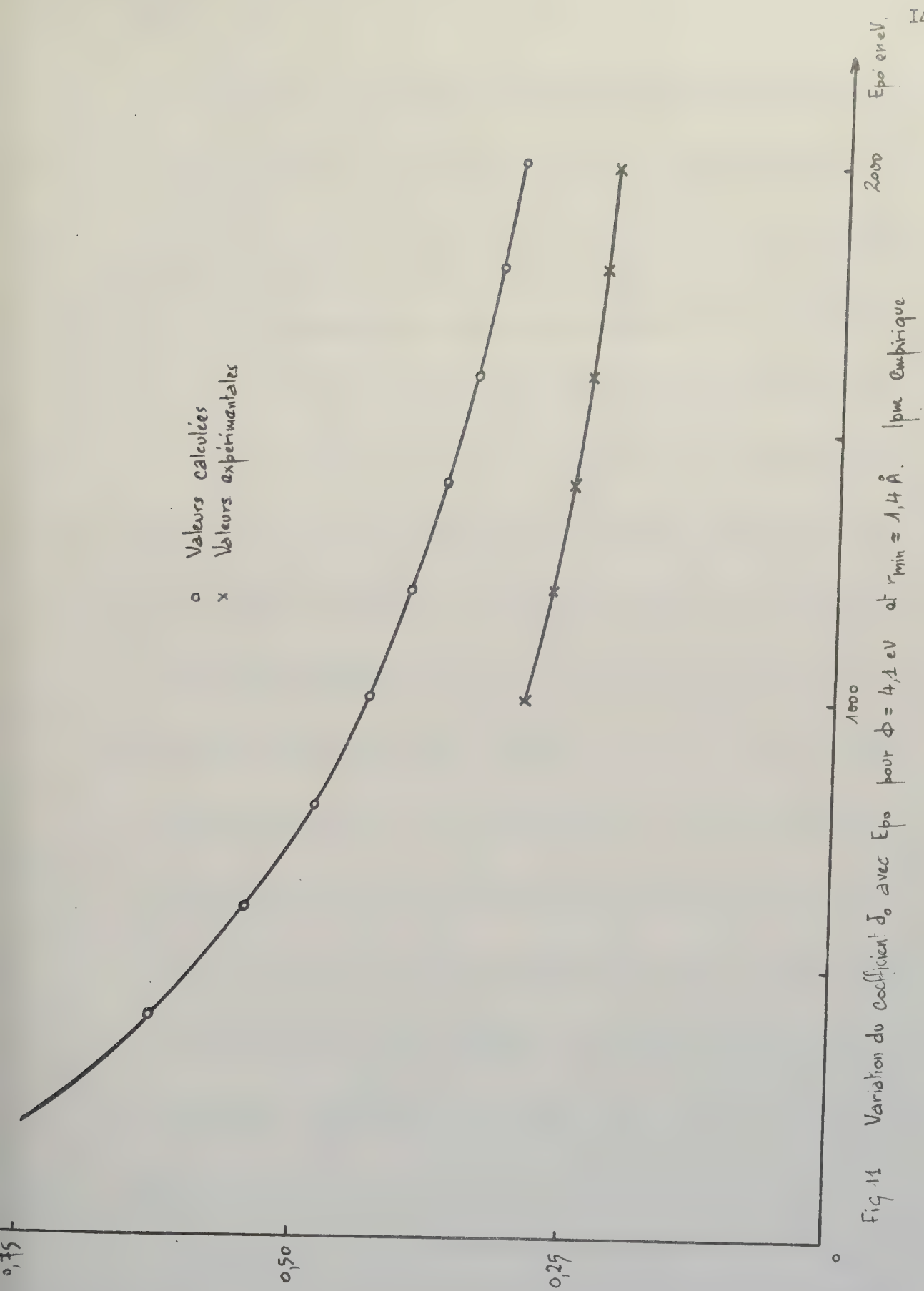


Fig 10 : Efficacité des électrons primaires dans le cuivre pour différents paramètres d'impact  $r_{min}$  dont les valeurs sont données près des courbes correspondantes. Le  $l_{pm}$  des E.S a été choisi constant et égal à  $27 \text{ Å}$ .  
Travail de sortie  $W = 44.4 \text{ eV}$



Ce calcul n'a évidemment pas la prétention de la rigueur et ne constitue qu'un pis-allé dans l'ignorance des valeurs réelles du lpm. Nous avons tracé dans la figure I3 la distribution électronique des ES correspondant au cas du lpm constant. Nous pouvons constater un excellent accord entre les résultats théoriques et les valeurs expérimentales de SHEIBNER et THARP. En particulier nous pouvons noter la présence, tant dans les uns que dans les autres, d'un léger renflement de la courbe pour une même valeur de l'énergie secondaire. Cet accord constitue un test sérieux pour nos calculs en dépit des choix arbitraires du paramètre d'impact minimal et du lpm. Notons que la forme de la distribution est liée à la constance du lpm et non à la valeur particulière adoptée. Nous pouvons constater encore qu'il a été nécessaire de déplacer légèrement la courbe théorique pour amener son maximum en coïncidence avec celui de la courbe expérimentale et que la largeur du pic calculé est supérieure à la largeur du pic mesuré. Ces deux désaccords proviennent du choix d'un lpm constant. Si l'on permet à cette quantité de croître aux faibles

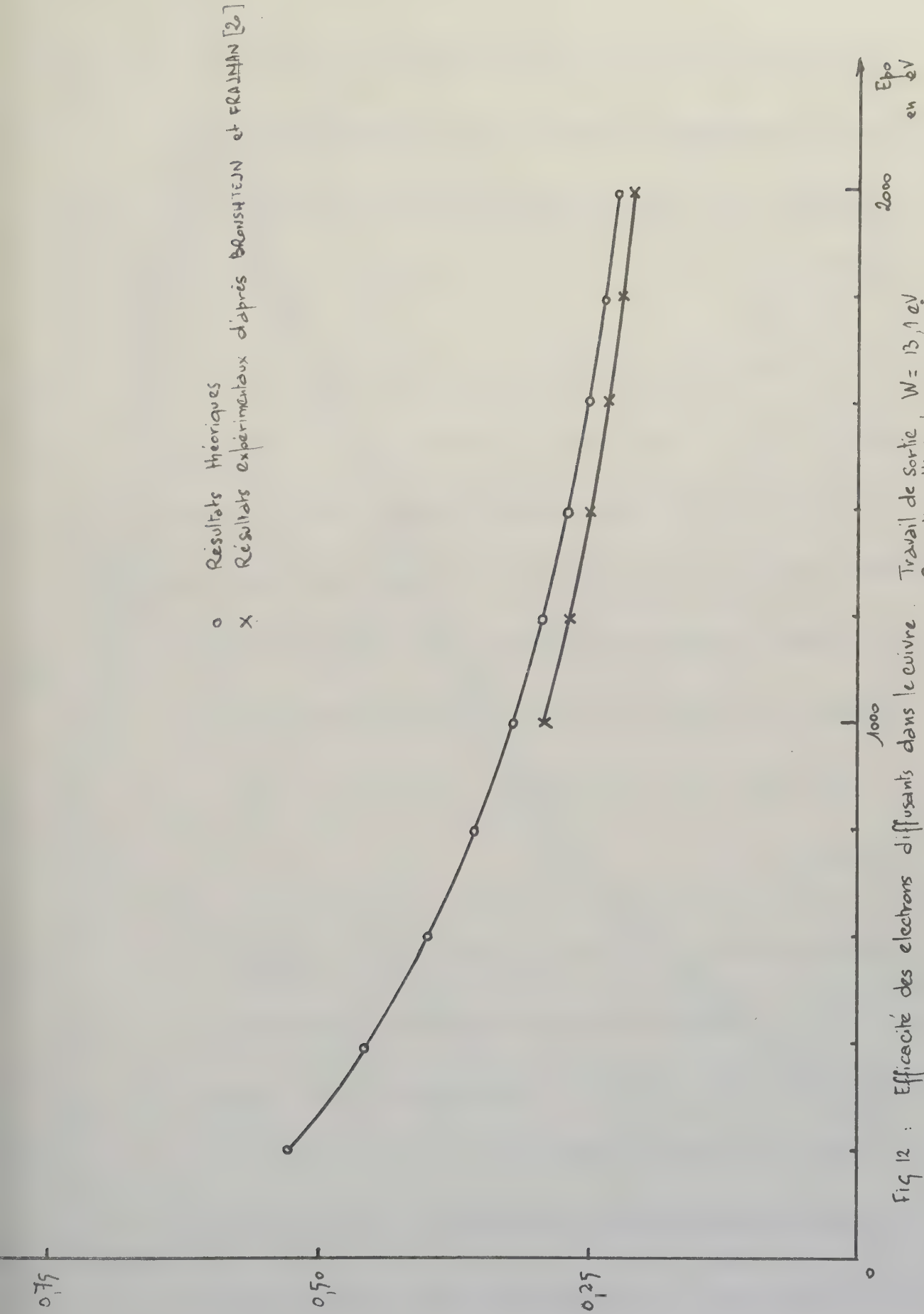


Fig 12 : Efficacité des électrons diffusants dans le cuivre.

énergies, ce que l'on sait de l'expérience, ces deux écarts doivent s'amenuiser. Le désaccord aux grandes énergies peut s'expliquer par le fait que nous n'avons pas pris en compte les ERI.

Pour obtenir les résultats correspondants à ceux que nous venons de décrire, nous avons utilisé pour l'Or les résultats de BEAGLEHOLE [194] et pour l'Argent les résultats de Mme ROBIN [202] relatifs à la fonction perte d'énergie. Nous avons éliminé de la courbe obtenue par Mme ROBIN le pic de plasmon de 3,8 eV. Ce dernier pic serait à prendre de la manière indiquée dans le § 4 sous réserve que l'approximation des électrons libres convienne.

Différents calculs ont été réalisés pour ces deux éléments.

- deux d'entre eux utilisent les résultats de la théorie du transport de PUFF, l'un avec le lpm de QUINN (1963), l'autre avec celui de RITCHIE et ASHLEY.

- les deux autres calculs effectués sont les correspondants des précédents mais les résultats de PUFF y sont remplacés par

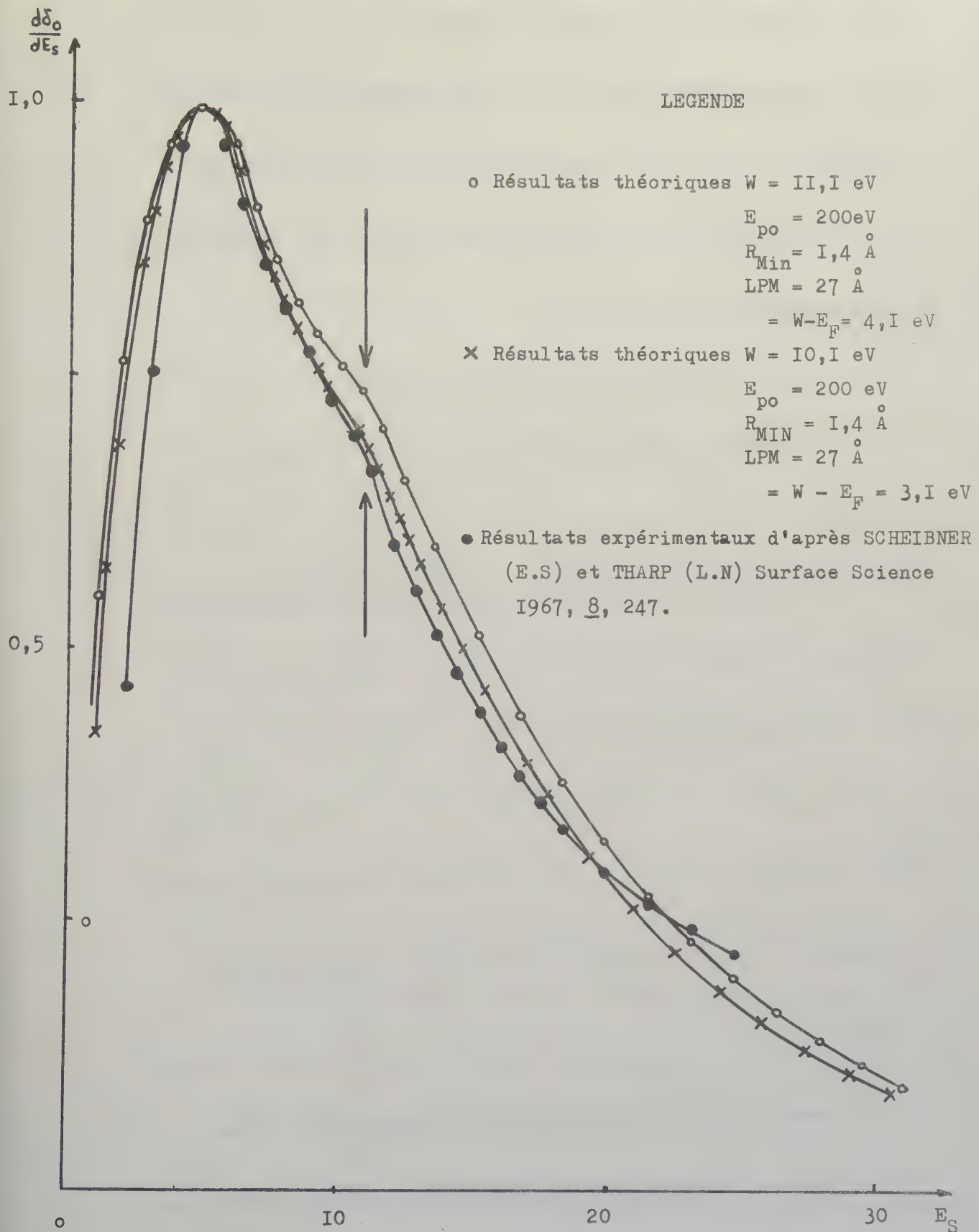


fig. I3. Distribution énergétique des électrons secondaires dans le cuivre.

ceux de WOLFF sur la théorie du transport.

Faute de renseignements expérimentaux sur  $\delta_0$ , la comparaison n'a pu être faite dans le cas de l'Or. Pour l'Argent la pente de la courbe calculée est trop grande par rapport à la pente de la courbe mesurée.

L'accord pour les distributions énergétiques n'est que qualitatif. Nous pouvons, à ce sujet, faire les remarques suivantes :

1) Les résultats expérimentaux sont anciens, contrairement au cas du cuivre. Ils sont dus à RUDBERG (1936). L'évolution de la technique du vide a montré que l'influence des vapeurs résiduelles dans l'enceinte de travail était grande. En particulier pour les distributions énergétiques ces vapeurs peuvent modifier la valeur du travail de sortie et ainsi changer la valeur du pic.

2) Dans le cas de l'Or la courbe expérimentale se situe entre les courbes déduites des valeurs calculées du  $\text{lpm}$  et la courbe obtenue pour un  $\text{lpm}$  constant. De plus, la courbe expé-

rimentale est assez proche des premières courbes avant le maximum et de la dernière après le sommet. Contrairement à la courbe calculée, la courbe expérimentale ne révèle aucune structure fine.

Les désaccords sur la largeur du pic peuvent provenir:

-partiellement du fait que la courbe expérimentale a été obtenue pour  $E_{po} = 155$  eV et les courbes calculées pour  $E_{po} = 200$  eV, car d'après PALMBERG, l'accroissement de  $E_{po}$  réduit la largeur du pic.

-plus vraisemblablement d'une estimation excessive de la variation du lpm avec l'énergie lors de l'utilisation de la formule de RITCHIE et ASHLEY au delà du maximum. Dans ce domaine l'approximation  $lpm = Cte$  donne de meilleurs résultats.

3) Dans le cas de l'Argent, la courbe expérimentale possède un pic plus large que ceux des autres courbes. Le désaccord est le plus grand aux grandes énergies secondaires en raison de la présence des ERI dans la courbe expérimentale.

Remarquons cependant, qu'une comparaison sérieuse ne pourra être effectuée pour ces deux derniers éléments que dans la mesure où de nouveaux résultats expérimentaux seront disponibles.

- |   |                                                  |                                       |                    |
|---|--------------------------------------------------|---------------------------------------|--------------------|
| 1 | Transport: PUFF                                  | $\alpha = \frac{r_{min} \omega}{v_p}$ | 1pm QUINN (1963)   |
| 2 | Transport: PUFF                                  | $\alpha = \frac{r_{min} \omega}{v_p}$ | 1pm RITCHIE-ASHLEY |
| 3 | Transport: WOLFF                                 | id                                    | 1pm QUINN (1963)   |
| 4 | Transport: WOLFF                                 | id                                    | 1pm RITCHIE-ASHLEY |
| 5 | Courbe expérimentale d'après BLONSHTEIN et SEGAL |                                       |                    |

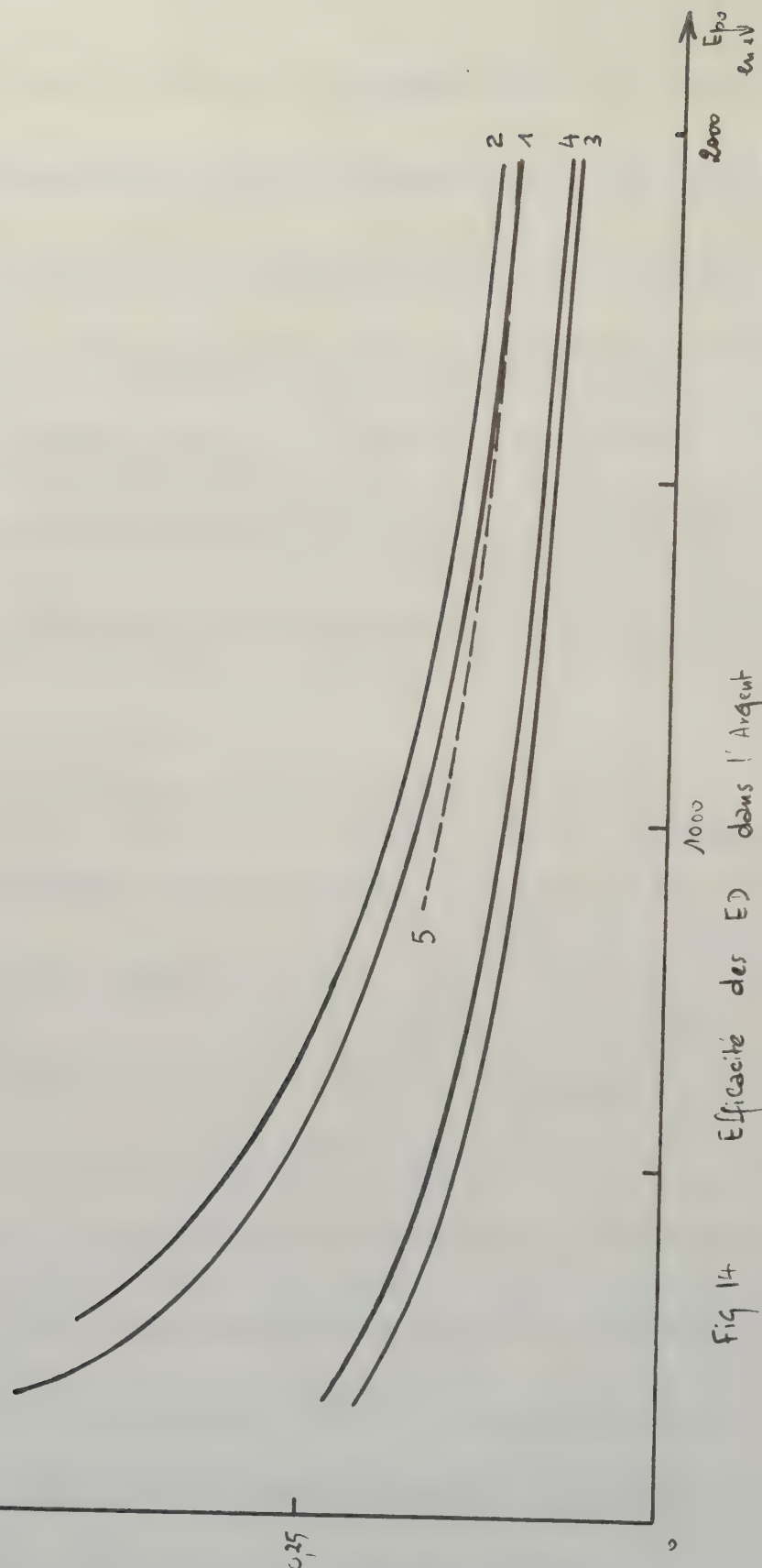


Fig 14 Efficacité des ED dans l'Argent

|   |                   |                                          |           |                |
|---|-------------------|------------------------------------------|-----------|----------------|
| 1 | Transport : PUFF  | $\alpha = \frac{r_{min} \omega}{\eta p}$ | 1 $\mu m$ | Quinn (1963)   |
| 2 | Transport : PUFF  | id                                       | 1 $\mu m$ | Ritchie-Ashley |
| 3 | Transport : Wolff | id                                       | 1 $\mu m$ | Quinn (1963)   |
| 4 | Transport : Wolff | id                                       | 1 $\mu m$ | Ritchie-Ashley |

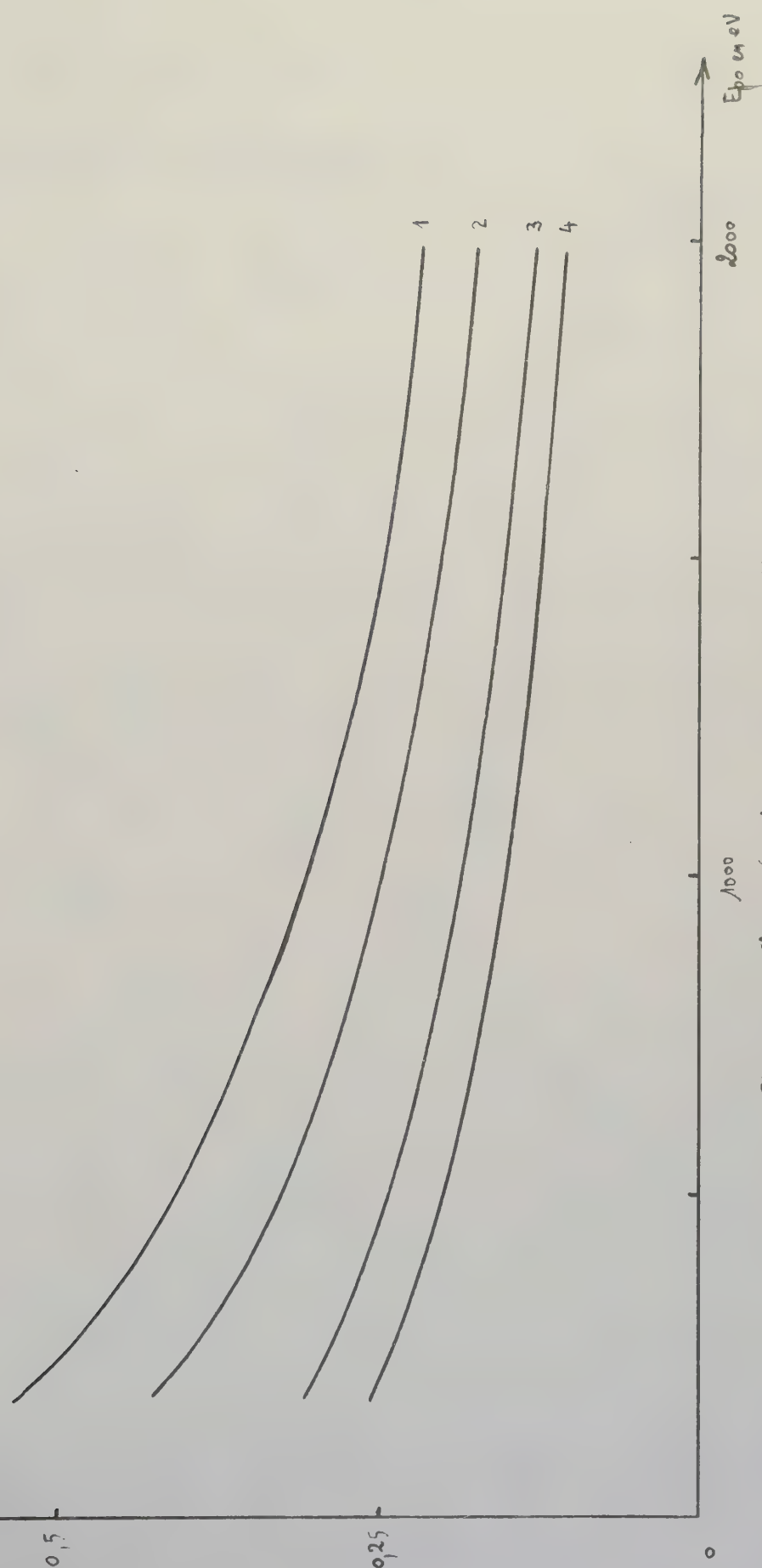


Fig 15 Efficacité des ED dans l'Or

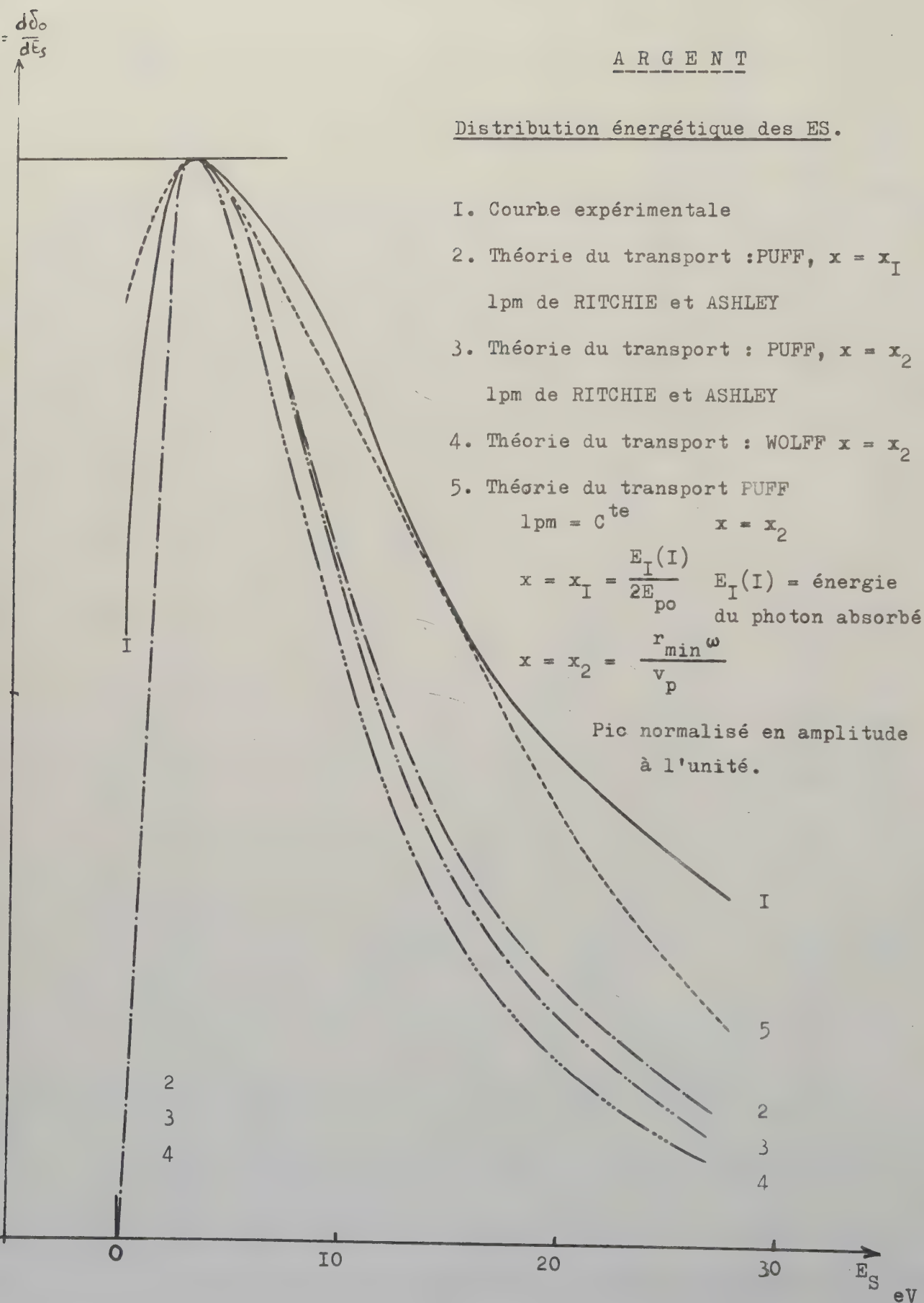
A R G E N TDistribution énergétique des ES.

Fig.I6 Distribution énergétique des électrons secondaires dans l'Argent.

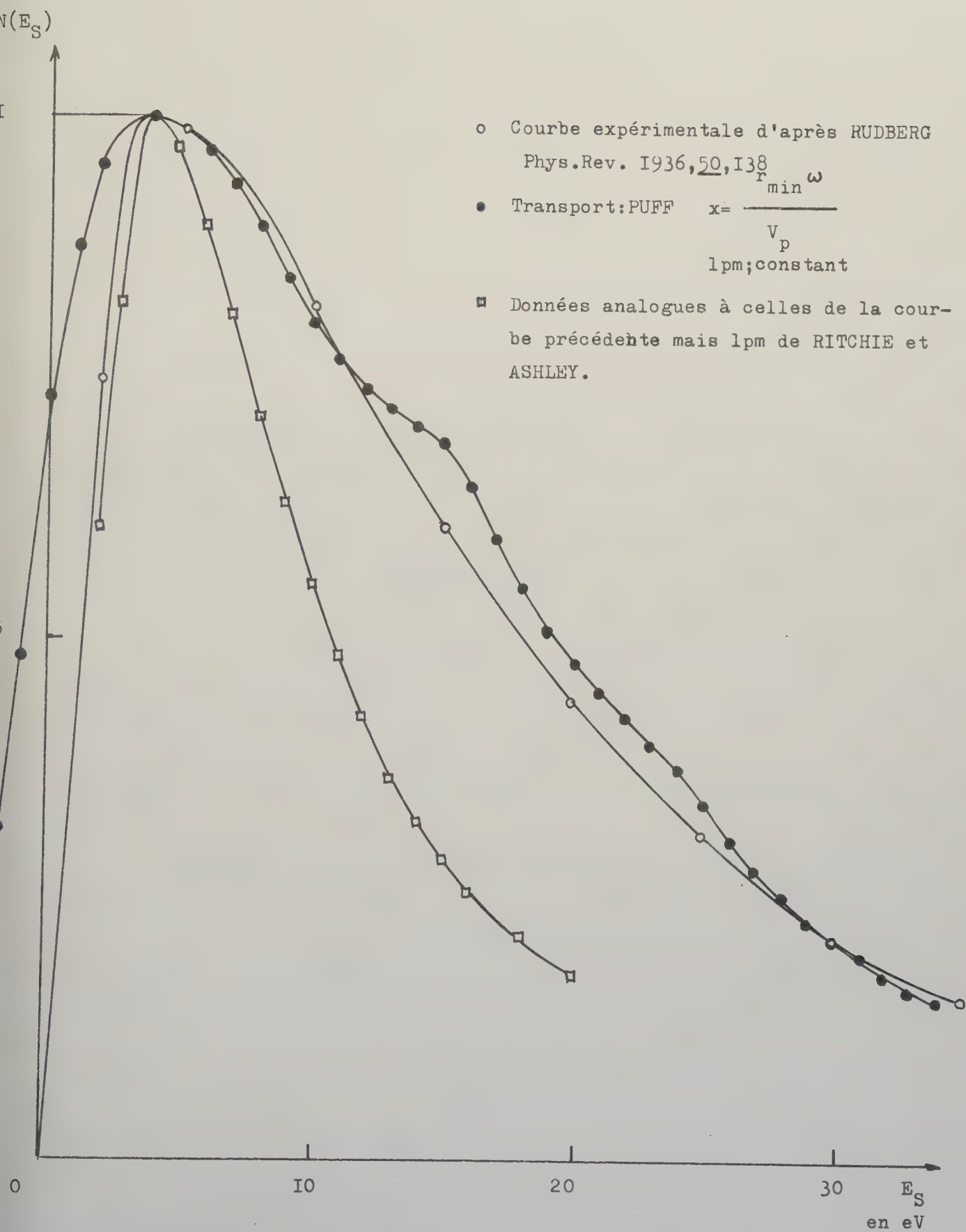


Fig.I7 Distribution énergétique des électrons secondaires dans l'Or



CHAPITRE 6

-:-

C O N C L U S I O N

-:-

C O N C L U S I O N .

L'émission électronique secondaire induite par bombardement électronique prend naissance lorsqu'un faisceau d'électrons vient frapper une surface solide. Parmi les électrons émis, certains sont des électrons primaires réfléchis, d'autres, appartenant initialement à la cible, constituent les vrais électrons secondaires.

Expérimentalement la séparation entre ces deux groupes d'électrons est possible bien qu'arbitraire à un certain degré. On peut dès lors définir et mesurer un rendement secondaire vrai  $\delta$  et la contribution  $\delta_0$  à ce rendement des électrons primaires qui s'enfoncent dans le solide.

Le but que nous nous étions fixé était de retrouver par le calcul les variations des deux coefficients  $\delta$  et  $\delta_0$  obtenus expérimentalement par variation de l'énergie primaire  $E_{po}$ , ainsi que la distribution énergétique des électrons secondaires.

Notre travail a été d'une double nature :

- phénoménologique,
- quantique.

La théorie phénoménologique a été améliorée en particulier par l'introduction d'une profondeur de libération constante pour les électrons secondaires. La courbe  $\delta(E_{po})$  ainsi obtenue sur la base d'un certain nombre d'hypothèses simplificatrices s'accorde d'excellente façon avec la courbe expérimentale. Il est particulièrement remarquable que la courbe expérimentale puisse être décrite, au delà du maximum, par une fonction puissance dont l'exposant est en liaison étroite avec celui de MAKHOV donnant la profondeur de pénétration des électrons primaires en fonction de l'énergie primaire.

En nous appuyant sur différents résultats expérimentaux, nous avons, par ailleurs, donné un support quantitatif à l'hypothèse généralement admise de l'égalité de la profondeur de pénétration des électrons primaires et de la profondeur de libération des électrons secondaires. L'accord obtenu est meilleur si l'on remplace la profondeur maximale des pénétrations par la profondeur maximale atteinte par la fraction  $\frac{I}{e}$  des électrons initialement présents dans le faisceau primaire.

La théorie quantique est restreinte aux métaux et les calculs numériques à l'Aluminium et aux métaux nobles.

La théorie quantique considère deux étapes principales dans le phénomène d'émission électronique secondaire :

- le processus d'excitation des électrons secondaires,
- le processus de transport de ces derniers vers la surface

libre du solide et la traversée de la barrière de potentiel.

Utilisant les résultats de PUFF et WOLFF pour le transport, nous nous sommes attachés particulièrement au processus d'excitation.

La théorie telle qu'elle avait été formulée jusqu'ici ne prenait en compte que l'excitation par transitions individuelles.

Nous avons rappelé que la théorie reposant sur la base des deux hypothèses suivantes,

- interaction individuelle entre électron primaire et électron de cristal,

- coulombienne pure ou avec effet d'écrantage statique,

ne s'accordait pas avec l'expérience, même avec des lpm supérieurs à ceux que nous avons utilisés par la suite.

Nous avons évalué la probabilité d'émission des électrons secondaires par deux modes différents d'amortissement d'un plasmon volumique (création d'une paire électron-trou, création de deux paires électron-trou) et montré que pour les métaux normaux, tels

que l'Aluminium, la probabilité d'excitation via les modes collectifs n'était absolument pas négligeable. L'accord avec l'expérience obtenu, bien que considérablement meilleur que dans les théories précédentes, n'est pas totalement satisfaisant à relativement faible énergie. Un meilleur accord est à prévoir si l'on tient compte du ralentissement du faisceau primaire.

La décroissance des plasmons volumiques par interaction avec la surface n'a pas été prise en compte, compte tenu du fait que la théorie du transport de WOLFF et PUFF a été formulée par un métal semi-infini.

Pour les métaux contenant des électrons d, en particulier pour les métaux nobles, la contribution des électrons s-p n'apporte qu'une relativement faible contribution à l'émission électronique secondaire.

Nous avons développé une théorie initialement due à BAROODY et FRÖHLICH et établi une liaison entre la conductibilité optique entre-bandes et l'émission électronique secondaire reposant sur l'hypothèse que les transitions à partir des niveaux d sont de caractère individuel.

L'accord avec l'expérience est tout à fait remarquable pour le cuivre (seul élément noble pour lequel nous ayons des résultats expérimentaux récents donc non suspects de contamination superficielle) tant du point de vue rendement que du point de vue distribution énergétique. Tout particulièrement un pic de structure fine de notre courbe théorique s'accorde en amplitude et en position avec un pic analogue de la courbe expérimentale.

En conclusion à notre étude, il apparaît que dans l'excitation des électrons secondaires :

1) les modes collectifs sont importants dans le cas des métaux normaux,

2) les transitions entre-bandes à partir des niveaux d sont prépondérantes lorsque ces niveaux sont suffisamment proches de la surface de Fermi. C'est le cas des métaux de transition et des métaux nobles.

Un travail ultérieur sur ce sujet devrait reconsidérer les questions liées à la limitation de la profondeur de libération des électrons secondaires, en particulier des points de vue :

- freinage des électrons primaires,

- validité de l'utilisation de l'équation de transport de

BOLTZMANN,

- amortissement des plasmons volumiques par interaction avec

la surface,

- contribution des plasmons superficiels.



APPENDICE

--:-

RAPPELS SUR LA THEORIE DE ADLER ET QUINN

-:-:-:-



# RAPPELS SUR LA THEORIE DE ADLER

En utilisant les règles de FEYNMAN [A.I-A.2] établies pour la théorie du positron, l'énergie propre d'un électron d'impulsion  $\vec{p}$ , d'énergie  $E_p$  et de fonction d'onde  $\psi_p(\vec{r})$  dans le cristal est donnée [A.3] par :

$$E_{\text{propre}} = \frac{e^2}{T} \iint d\vec{r}_I dt_I d\vec{r}_2 dt_2 \psi_p(\vec{r}_I) \psi_p^*(\vec{r}_2) \exp [i E_p (t_2 - t_I)] K_+(2,I) \cdot G_+(2,I) \quad (\text{A.I})$$

où :

$G_+(2, I)$  est le propagateur de polarisation dans le cristal et  $K_+(2,I)$  le propagateur électronique pour une particule indiscernable.

Ces propagateurs sont définis à l'aide des relations :

$$K_+(2,I) = \int d\vec{k} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\Omega}{(2\pi)^4} \frac{i}{\omega - E_k(1-i\delta)} \psi_k(\vec{r}_2) \psi_k^*(\vec{r}_I) \exp [-i \omega (t_2 - t_I)] \quad (\text{A.2})$$

$$G_+(2,1) = \int_{B_1} d\vec{q} \sum_{\vec{K}} \sum_{\vec{K}''} \left( \frac{d\omega}{(2\pi)^4} \frac{4\pi \epsilon^{-1}(\vec{q}+\vec{K}, \vec{q}+\vec{K}'', \omega)}{|\vec{q} + \vec{K}|^2} \right. \\ \left. \cdot i\vec{q} (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \cdot -i\omega (t_2 - t_1) \right. \\ \left. \exp(i\vec{K} \vec{r}_2) \exp(-i\vec{K}'' \vec{r}_1) \right) \quad (A.3)$$

Dans l'expression (A.2)  $\delta$  est un infiniment petit positif assurant que seules les fréquences positives se propagent vers le futur et que seules les fréquences négatives se propagent vers le passé.

$E_k$  est l'énergie de l'électron et  $\psi_k(\vec{r})$  sa fonction d'onde normalisée à l'unité dans le volume  $\Omega$  du cristal. La représentation est celle du schéma de zone étendu, l'intégration porte sur la totalité de l'espace  $\vec{k}$ .

Dans l'expression (A.3)  $\vec{K}$  et  $\vec{K}''$  sont des vecteurs du réseau réciproque et l'intégration porte sur la seule première zone de BRILLOUIN.

$\epsilon^{-1}(\vec{q} + \vec{K}, \vec{q} + \vec{K}'', \omega)$  est la fonction diélectrique inverse [A 4].

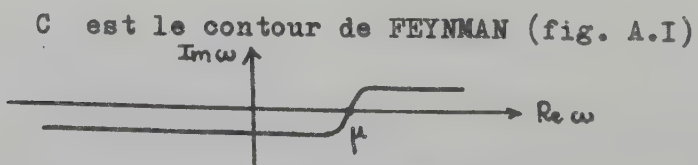


fig A.I - Contour de FEYNMAN.

Une quantité analogue  $E_{\text{propre}}^{(0)}$  à l'expression (A.1)

peut être définie comme étant l'énergie propre de l'électron

dans le vide, mais on doit faire les modifications suivantes :

$K_+(2,1)$  est remplacé par  $K(2,1)$  propagateur d'une particule discernable.

$$K(2,1) = \int \vec{dk} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{(2\pi)^4} \frac{i}{\omega - \frac{k'^2}{2m} + i\delta} e^{i\vec{k}'(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} e^{-i\omega(t_2 - t_1)} \quad (\text{A.4})$$

d'autre part  $G_+(2,1)$  devient :

$$G_+(2,1) = \int \vec{dk} \int_C \frac{d\omega}{(2\pi)^4} \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} e^{-i\omega(t_2 - t_1)} \quad (\text{A.5})$$

l'intégration étant étendue à la totalité de l'espace  $\vec{k}$ .

La partie réelle de  $E_{\text{propre}} - E_{\text{propre}}^{(0)}$  donne l'écart d'énergie entre l'électron indiscernable dans le solide et l'électron discernable dans le vide c'est-à-dire la somme de l'énergie d'échange et de l'énergie de corrélation de l'électron considéré.

La partie imaginaire de cette même quantité donne le taux d'amortissement ou de perte d'énergie de l'électron [A.5 , A.6]

donc le taux de transmission de l'énergie de l'électron au système solide dans lequel il se meut.

La figure A.2 donne les graphes de FEYNMAN pour le processus d'énergie propre.

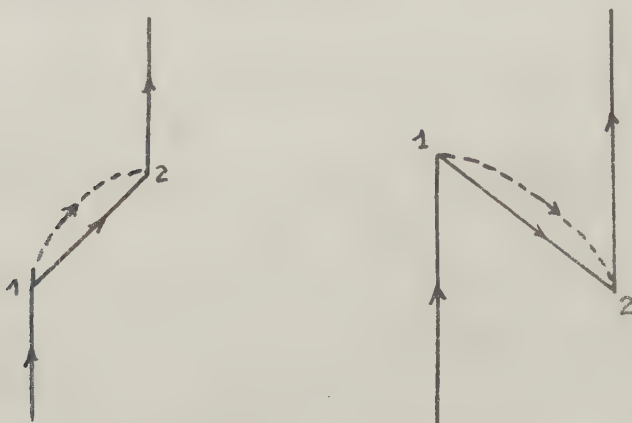


fig. A 2 - Graphes de FEYNMAN pour les processus d'énergie propre .

Pour faciliter la comparaison entre  $E_{\text{propre}}$  et  $E_{\text{propre}}^{(0)}$ , il est nécessaire de déformer le contour d'intégration dans le plan  $\omega'$  complexe utilisé dans le calcul de  $E_{\text{propre}}$ , de façon à l'amener en coïncidence avec celui utilisé pour le calcul de  $E_{\text{propre}}^{(0)}$  [A.3, A.5].

Lors de cette déformation le contour traverse le pôle

$\omega' = E_p - E_{p=q}$  si bien que l'énergie propre s'écrit :

$$E_{\text{propre}} = E_{\text{résidu}} + E_{\text{ligne}}$$

avec :

$$E_{\text{résidu}} = 4\pi e^2 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{K}} \sum_{\vec{K}''} \frac{\epsilon^{-I}(\vec{q}+\vec{K}, \vec{q}+\vec{K}'', E_p - E_{p-q})}{|\vec{q} + \vec{K}|^2}$$

$$E_0 < E_{p-q} < E_p$$

$$\cdot M^*(\vec{q}, \vec{K}'') \cdot M(\vec{q}, \vec{K}) \quad (A.6)$$

et

$$E_{\text{ligne}} = -\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^4} \int d\vec{q} \sum_{\vec{K}} \sum_{\vec{K}''} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \frac{\epsilon^{-I}(\vec{q}+\vec{K}, \vec{q}+\vec{K}'', i\eta) (E_p - E_{p-q})}{[\eta^2 + (E_p - E_{p-q})^2] |\vec{q} + \vec{K}|^2}$$

$$\cdot M^*(\vec{q}, \vec{K}'') \cdot M(\vec{q}, \vec{K}) \quad (A.7)$$

Dans ces expressions :

$$M(\vec{q}, \vec{K}) = \langle \vec{p} | \exp [i(\vec{q} + \vec{K}) \cdot \vec{r}] | \vec{p} - \vec{q} \rangle \quad (A.8)$$

ADLER [A.3] a montré que  $E_{\text{ligne}}$  était réel. Comme l'énergie propre d'un électron dans le vide est, elle aussi, réelle, il en résulte que la partie imaginaire de  $E_{\text{propre}} = E_{\text{propre}}^{(*)}$  est due à la seule contribution de  $E_{\text{résidu}}$ .

Finalement le taux de perte d'énergie de l'électron est :

$$\frac{dE_p}{dt} = \frac{e^2}{\pi^2} \int_{E_0 < E_{p-q} < E_p} d\vec{q} \sum_{\vec{K}} \sum_{\vec{K}''} \frac{\text{Im} \epsilon^{-1}(\vec{q}+\vec{K}, \vec{q}+\vec{K}'', E_p - E_{p-q})}{|\vec{q} + \vec{K}|^2} (E_p - E_{p-q}) M^*(\vec{q}, \vec{K}) \cdot M(\vec{q}, \vec{K}) \quad (\text{A.9})$$

Dans l'expression (A.9) on distingue 3 groupes de termes :

Le terme pour lequel  $\vec{K} = \vec{K}'' = 0$  est l'analogie de l'expression du gaz d'électrons libres.

Les termes  $\vec{K} = \vec{K}'' \neq 0$  représentent les processus "umklapp".

Enfin, les termes  $\vec{K} \neq \vec{K}''$  représentent un effet composite des processus "umklapp" et des corrections de champ local de la fonction diélectrique.

L'expression (A.9) peut se récrire :

$$\frac{dE_p}{dt} = \frac{e^2}{\pi^2} \int_{E_0 < E_{p-q} < E_p} d\vec{q} (E_p - E_{p-q}) \left[ K(\vec{p}, \vec{q}) + D(\vec{p}, \vec{q}) + F(\vec{p}, \vec{q}) \right] \quad (\text{A.10})$$

avec :

$$F(\vec{p}, \vec{q}) = \text{Im} \frac{\epsilon_F^{-1}(\vec{q}, \omega)}{q^2} |M(\vec{q}, 0)|^2 \quad (\text{A.II})$$

$$D(\vec{p}, \vec{q}) = \text{Im} \sum_{\vec{K} \neq 0} \frac{\epsilon_F^{-1}(\vec{q} + \vec{K}, \omega)}{|\vec{q} + \vec{K}|^2} |M(\vec{q}, \vec{K})|^2 \quad (\text{A.I2})$$

$$K(\vec{p}, \vec{q}) = \text{Im} \sum_{\vec{K} \neq \vec{K}''} \frac{\epsilon_F^{-1}(\vec{q} + \vec{K}, \omega) \epsilon_F^{-1}(\vec{q} + \vec{K}'', \omega)}{|\vec{q} + \vec{K}|^2 |\vec{q} + \vec{K}''|^2} \langle 2 \text{Re} RMM^* \rangle_{av k}$$

$$G_F(\vec{q} + \vec{K}, \omega) \quad (\text{A.I3})$$

Dans cette dernière expression :

$$R(\vec{q}, \vec{k}, \vec{K}, \vec{K}'') = \langle \vec{k} | \exp [-i(\vec{q} + \vec{K}) \cdot \vec{r}] | \vec{k} + \vec{q} + \vec{K} \rangle \\ \langle \vec{k} + \vec{q} + \vec{K} | e^{i(\vec{q} + \vec{K}'') \cdot \vec{r}} | \vec{k} \rangle \quad (\text{A.I4})$$

$$G_F(\vec{q} + \vec{K}, \omega) = \frac{e^2}{\pi^2} \int d\vec{k} \frac{[f_0(E_k) - f_0(E_{k+q+K})]}{\hbar\omega + E_k - E_{k+q+K}} \quad (\text{A.I5})$$

$\epsilon_F^{-1}(\vec{q}, \omega)$  est la constante diélectrique du gaz d'électrons libres calculée par LINDHARD [174].

ADLER a exprimé  $K(\vec{p}, \vec{q})$  sous la forme :

$$K(\vec{p}, \vec{q}) = A(\vec{p}, \vec{q}) + B(\vec{p}, \vec{q}) + C(\vec{p}, \vec{q}) \quad (\text{A.I6})$$

et il a évalué ces trois termes pour des électrons ayant des

énergies voisines du niveau de FERMI en déterminant les valeurs

moyennes de  $M(\vec{q}, \vec{K})$ ,  $M(\vec{q}, \vec{K}^*)$  et  $R(\vec{q}, \vec{k}, \vec{K}, \vec{K}^*)$

dans un modèle "une onde plane orthogonale".

Pour l'Aluminium, il arrive aux conclusions suivantes :

1/ Les effets "umklapp" et les effets composites donnent une correction de quelques % par rapport au résultat obtenu dans l'approximation des électrons libres.

2/ Ces effets ne modifient que très peu le taux de création des plasmons,

3/ La présence de régions planes sur la surface de FERMI accroît fortement le taux de perte d'énergie des électrons excités. De telles régions planes existent pour le cuivre ce qui permet d'expliquer les faibles valeurs obtenues expérimentalement pour le libre parcours moyen.

On doit noter aussi, que si l'énergie des électrons devient grande par rapport au niveau de FERMI, les effets des termes "umklapp" et composites diminuent encore. Ce résultat a été noté indépendamment par KANE [A.7] pour le Silicium.

## APPROXIMATION DES ELECTRONS LIBRES

J.J. QUINN et R.A. FERRELL [A.5] avaient formulé antérieurement à ADLER la théorie de l'amortissement des électrons chauds dans l'approximation des électrons libres. Utilisant la fonction diélectrique de LINDHARD, ils font l'hypothèse que les trous positifs sont libres eux aussi.

Lors du passage de l'électron chaud ou électron primaire dans le système à N électrons, il y a atténuation de l'état monoélectronique dont le temps de vie est égal à :

$$\tau = -\frac{1}{2} \frac{1}{\text{Im}(E_{\text{propre}})} \quad (\text{A.I7})$$

$$\Delta E_{\text{propre}} = E_{\text{propre}} - E_{\text{propre}}^{(0)} \quad (\text{A.I8})$$

On peut considérer 3 domaines de transmission d'énergie :

- celui des transitions individuelles,
- celui des plasmons, enfin,
- celui du domaine intermédiaire où la transmission d'énergie se fait aussi bien par excitations individuelles que par excitation collective.

QUINN [A.8] a évalué le libre parcours moyen des électrons

d'impulsion  $p = \hbar k_F$  dans le cas des excitations individuelles.

Son résultat est :

$$l = 32 \sqrt{\beta} \frac{x^2}{(x^2 - 1)^2} \frac{1}{\text{Arc tg } \sqrt{1-\beta} + \frac{\sqrt{\beta}}{1+\beta}} \quad (\text{A.19})$$

$$\text{avec } \beta = \frac{\alpha r_s}{\pi} \quad r_s = 2,07 \text{ pour Al}$$

Le lpm pour la création des plasmons est :

$$\lambda = \frac{2 a_0 E_p}{\hbar \omega_p} \frac{1}{\text{Ln} \left| \frac{k_c}{p - (p^2 - 2m\hbar\omega_p)^{1/2}} \right|} = \frac{2 a_0 E_p}{\hbar \omega_p} \frac{1}{\text{Ln} \left[ \frac{p_F^2 + 2m\hbar\omega_p}{p - (p^2 - 2m\hbar\omega_p)^{1/2}} \right]} \quad (\text{A.20})$$

où  $\omega_p/2\pi$  est la fréquence plasmon.

Si l'énergie des électrons primaires est grande

$$\lambda \approx \frac{2 a_0 E_p}{\hbar \omega_p} \frac{1}{\text{Ln} \frac{\theta_{CE}}{\theta_E}} \quad (\text{A.21})$$

$$\text{où } \theta_{CE} = \frac{\hbar k_c}{p} \quad \theta_E = \frac{\hbar \omega_p}{2E_p}$$

$k_c$  étant le vecteur d'onde de cut-off. Ce résultat est celui

de FERRELL [A.9, A.10].

Dans ce calcul la variation de l'énergie de plasmon en fonction du vecteur d'onde a été négligée. Le résultat précédent est identique à celui de PINES et NOZIERES A.II

$$\lambda_{pl} = \frac{2\pi \epsilon_0 E_p}{\hbar \omega_p} \frac{1}{\ln \frac{v}{v_F}} \quad (A.22)$$

il suffit de remarquer que  $\hbar k_c v_F = \hbar \omega_p$  où  $v_F = \frac{p_F}{m}$

est la vitesse de l'électron au niveau de FERMI et  $k_c$  le vecteur d'onde de cut-off au delà duquel le plasmon n'est plus défini comme excitation collective précise du système à N électrons.

Dans le domaine intermédiaire  $k \sim k_c$  FERRELL [186] a introduit dans la section efficace différentielle de diffusion un facteur  $G(\theta, \theta_c)^{-1}$  traduisant l'accroissement de l'amortissement des plasmons au voisinage du cut-off.

Finalement RITCHIE et ASHLEY [A.I2] ont procédé aux corrections apportées aux valeurs des lpm par l'effet d'échange. Globalement ces corrections reviennent pratiquement à multiplier, dans le domaine des densités électroniques métalliques, le lpm par

un facteur de 1,7 à 1,8.

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] AUSTIN (L) et STARK (H)  
Ann. d. Phys. Lpz. 1902,9,271
- [2] MAC KAY (K.G)  
Adv.in Electronics and Electron Physics  
Acad.Press 1948,I,65
- [3] BRUINING (H)  
Physis and Applications of Secondary Electron Physics  
Pergamon Press London 1954
- [4] KOLLATH (R)  
Handbuch d.Phys.  
Springer 1956,2I,232
- [5] DEKKER (A.J)  
Solid State Physics  
Acad.Press 1958,6,251
- [6] HAYMANN (P)  
J.Rech.C.N.R.S Fr. 1962,I3,357
- [7] HACHENBERG (O) et BRAUER (W)  
Adv. in Electronics and Electron Physics  
Acad.Press 1959,II,413
- [8] STEHBERGER (K.H)  
Ann. d.Phys. Lpz 1928,86,825
- [9] PALLUEL (P)  
CR.Acad.Sci.Paris 1947,224,1492
- [10] PALLUEL (P)  
CR.Acad.Sci.Paris 1947,224,1551
- [11] PALLUEL (P)  
CR.Acad.Sci.Paris 1947,225,383
- [12] NAKHODKIN (N.G) et ROMANOVSKIJ (V.A)  
Izv.AN URSS Ser.Fizika 1958,22,454
- [13] NAKHODKIN (N.G)  
Dissertation, Université d'Etat de Kiev 1954

- [14] NAKHODKIN (N.G) et ROMANOVSKIJ (V.A)  
Radiotekh.i Elektr. 1960,5,1260
- [15] DOBRETISOV (L.N) et MATSKEVICH (T.L)  
J.Tekh.Fiz. 1957,27,734 (1957,2,663)
- [16] BRONSHTEJN (I.M) et SEGAL (R.B)  
Fiz.Tverd.Tela 1959,1,1489 (1960,1,1365)
- [17] BRONSHTEJN (I.M) et SEGAL (R.B)  
Fiz.Tverd.Tela 1959,1,1500 (1960,1,1375)
- [18] BRONSHTEJN (I.M) et FRAJMAN (B.S)  
Fiz.Tverd.Tela 1961,3,1638 (1961,3,1188)
- [19] BRONSHTEJN (I.M) et FRAJMAN (B.S)  
Fiz.Tverd.Tela 1961,3,3220 (1961,3,2337)
- [20] BRONSHTEJN (I.M) et FRAJMAN (B.S)  
Radiotekh.i Elektr. 1962,7,1643
- [21] BRONSHTEJN (I.M) et DENISOV (S.S)  
Fiz.Tverd.Tela 1965,7,1846 (1965,7,1484)
- [22] KANTER (H)  
Phys.Rev. 1961,121,681
- [23] KANTER (H)  
Phys.Rev. 1961,121,677
- [24] BRONSHTEJN (I.M) et SEGAL (R.B)  
Fiz.Tverd.Tela 1959,1,1246 (1959,1,1142)
- [25] BRONSHTEJN (I.M) et FRAJMAN (B.S)  
Doklady Akad.Nauk 1960,135,1097 (1960,135,1273)
- [26] GOMOJUNOVA (M.V)  
Fiz.Tverd.Tela 1961,3,2319 (1962,3,1681)
- [27] BRONSHTEJN (I.M) et ROSCHIN (V.V)  
J.Tekh.Fiz. 1958,28,2200 (1958,3,2023)
- [28] BRONSHTEJN (I.M) et ROSCHIN (V.V)  
J.Tekh.Fiz. 1958,28,2476 (1958,3,2271)
- [29] FOWLER (H.A) et FARNSWORTH (H.E)  
Phys.Rev. 1958,111,103
- [30] SHUL'MAN (A.R) et GANICHEV (D.A)  
Fiz.Tverd.Tela 1960,3,530 (1960,3,495)
- [31] KISLIUK (P)  
Phys.Rev. 1961,122,405

- [32] ZOLLWEG (R.J)  
Surface Science 1964,2,409
- [33] MOROZOV (YU.A) et SHUL'MAN (A.R)  
Fiz.Tverd.Tela 1964,6,943 (1964,6,726)
- [34] NIEDERMAYER (R) et HOLZL (J)  
Physica Status Solidi 1965,II,65I
- [35] HEIL (H) et HOLLWEG (J.V)  
Phys.Rev. 1967,164,88I
- [36] HEIL (H) et HOLLWEG (J.V)  
Phys.Rev. 1967,164,887
- [37] SHUL'MAN (A.R), KORABLEV (V.V) et MOROZOV (Yu.A)  
Fiz.Tverd.Tela 1968,10,655 (1968,10,518)
- [38] BRONSHTEJN (I.M) et SEGAL (R.B)  
Fiz.Tverd.Tela 1959,I,1133 (1959,I,1036)
- [39] BRONSHTEJN (I.M) et SEGAL (R.B)  
Radiotekh.i Elektr. 1959,4,55I (1959,4,293)
- [40] BRONSHTEJN (I.M) et FRAJMAN (B.S)  
Fiz.Tverd.Tela 1961,3,137I (1961,3,995)
- [41] BRONSHTEJN (I.M) et FRAJMAN (B.S)  
Fiz.Tverd.Tela 1961,3,2859 (1962,3,2087)
- [42] BRONSHTEJN (I.M) et SHCHUCHINSKIJ (Ia.M)  
Radiotekh.i Elektr. 1962,7,356 (1962,7,335)
- [43] BRONSHTEJN (I.M) et SHCHUCHINSKIJ (Ia.M)  
Fiz.Tverd.Tela 1962,4,552 (1962,4,40I)
- [44] BRONSHTEJN (I.M) et DOLININ (V.A)  
Fiz.Tverd.Tela 1967,9,2718 (1968,2,2133)
- [45] APPELT (G)  
Ann.d.Phys. Lpz. 1961,7,30
- [46] BOLSHOV (V.G) et ZARUBIN (V.V)  
Fiz.Tverd.Tela 1959,I,462 (1959,I,416)
- [47] DJUBUA (B.Ch) et ERMOLAEV (L.A)  
Fiz.Tverd.Tela 1964,6,757 (1964,6,589)
- [48] DJUBUA (B.Ch) et ERMOLAEV (L.A)  
Fiz.Tverd.Tela 1964,6,760 (1964,6,757)
- [49] ERMOLAEV (L.A) et DJUBUA (B.Ch)  
Radiotekh.i Elektr. 1967,12,884 (1967,12,82I)

- [50] ERMOLAEV (L.A) et TSUPKO (Yu.K)  
Radiotekh.i Elektr. 1968,13,571
- [51] GILL (J.J) et HENDRICKS (C.D)  
J.Appl.Phys. 1967,38,4310
- [52] HOLLAND (L) et LAURENSEN (L)  
Nuovo Cimento Suppl. 1963,1,470
- [53] HOLLAND (L) et LAURENSEN (L)  
Nature G.B 1963,199,274
- [54] HOLLAND (L) et LAURENSEN (L)  
Nature G.B 1963,200,160
- [55] HÖLZL (J) et HEIMANN (B)  
Physica Status Solidi 1967,24,651
- [56] KANEFF (W)  
Ann.d. Phys. Lpz 1960,6,82
- [57] PALMBERG (P.W)  
J.Appl.Phys. 1967,38,2137
- [58] ROGALJA (L.M)  
Radiotekh.i Elektr. 1967,12,1680
- [59] EL SHERBINI (M.A) et ABDALLAH (I.I)  
Proc.Math.Phys.Soc. RAU 1964,28,47
- [60] KATZ (L) et PENFOLD (A.S)  
Rev.Modern Phys. 1952,24,28
- [61] SELIGER (H.H)  
Phys.Rev. 1955,100,1029
- [62] WORTHINGTON (C.R) et TOMLIN (S.G)  
Proc.Phys.Soc. 1956,69,401
- [63] LANE (R) et ZAFFARANO (D)  
Phys.Rev. 1954,94,960
- [64] YOUNG (I)  
J.Appl. Phys. 1956,27,1 et  
Phys. Rev. 1956,103,292
- [65] VIATSKIN (A.Ya) et MAKHOV (A.F)  
J.Tekh.Fiz. 1958,28,740 (1958,3,690)
- [66] MAKHOV (A.F) et GUTKIN (A.A)  
Izv.Vuz.AN Ser.Fizika 1958,1

- [67] KANICHEVA (I.R) et BURTSEV (V.V)  
Fiz. Tverd. Tela 1961,1,1250 (1959,1,1146)
- [68] BRONSHTEJN (I.M) et FRAJMAN (B.S)  
Fiz. Tverd. Tela 1961,3,1122 (1961,3,816)
- [69] HOLLIDAY (J.E) et STERNGLASS (E.J)  
J. Appl. Phys. 1959,30,1428
- [70] KANTER (H)  
Phys. Rev. 1961,121,461
- [71] KANTER (H) et STERNGLASS (E.J)  
Phys. Rev. 1962,126,620
- [72] BRONSHTEJN (I.M) et DENISOV (S.S)  
Fiz. Tverd. Tela 1964,6,1921 (1965,6,1515)
- [73] KALOUSEK (J) et MALAT (V)  
Czech. J. Phys. 1967,17,480
- [74] MALAT (V)  
Czech. J. Phys. 1967,17,516
- [75] MAKHOV (A.Ia)  
Fiz. Tverd. Tela 1960,2,2161 (1960,2,1934)
- [76] SHCHEMELEV (V.N), RUMSH (M.A) et DENISOV (E.P)  
Fiz. Tverd. Tela 1963,5,1132 (1963,5,827)
- [77] PALMBERG (P.W) et RHODIN (T.N)  
J. Appl. Phys. 1968,39,2425
- [78] QUINN (J.J)  
J. Appl. Phys. 1963,2,167
- [79] RITCHIE (R.H) et ASHLEY (J.C)  
J. Phys. Chem. Solids 1965,26,1689
- [80] COSSLETT (V.E) et THOMAS (R.N)  
Brit. J. Appl. Phys. 1964,15,235
- [81] COSSLETT (V.E) et THOMAS (R.N)  
Brit. J. Appl. Phys. 1964,15,883
- [82] COSSLETT (V.E) et THOMAS (R.N)  
Brit. J. Appl. Phys. 1964,15,1283
- [83] EHRENBURG (W) et FRANKS (J)  
Proc. Phys. Soc. 1953,66,1057
- [84] KANICHEVA (I.R) et BARZDO (B.F)  
Fiz. Tverd. Tela 1963,5,2561 (1964,5,1870)

- [85] STERNGLOSS (E.J) et WACHTEL (M.M)  
Phys. Rev. 1955,99,646
- [86] SHATAS (R.A), MARSHALL (J.F) et POMERANTZ (M.A)  
Phys. Rev. 1956,102,682)
- [87] KANTER (H)  
Ann. D. Phys. 1957,20,144
- [88] NAKHODKIN (N.G), OSTROUKHOV (A.A) et ROMANOVSKIJ (V.A)  
Fiz. Tverd. Tela 1962,4,1514 (1962,4,III2)
- [89] BRONSHTEJN (I.M) et DENISOV (S.S)  
Fiz. Tverd. Tela 1964,6,2644 (1965,6,2106)
- [90] BRONSHTEJN (I.M) et DOLININ (V.A)  
Fiz. Tverd. Tela 1966,8,3422 (1967,8,2744)
- [91] NAKHODKIN (N.G), OSTROUKHOV (A.A) et ROMANOVSKIJ (V.A)  
Fiz. Tverd. Tela 1963,5,41 (1963,5,26)
- [92] NAKHODKIN (N.G), OSTROUKHOV (A.A) et ROMANOVSKIJ (V.A)  
Fiz. Tverd. Tela 1965,7,210 (1965,7,161)
- [93] LAPONSKY (A.B) et WHETTEN (N.R)  
Phys. Rev. Letters 1959,3,510
- [94] LAPONSKY (A.B) et WHETTEN (N.R)  
Phys. Rev. 1960,120,801
- [95] SOSHEA (R.W)  
Thesis, Univ. of Minnesota, 1959
- [96] DEKKER (A.J)  
Phys. Rev. Letters, 1960,4,55
- [97] SOSHEA (R.W) et DEKKER (A.J)  
Phys. Rev. 1961,121,1362
- [98] GOETZ (G.G)  
Thesis, Univers. of Minnesota 1963
- [99] ABROYAN (I.A) et TITOV (A.I)  
Fiz. Tverd. Tela 1967,9,3628 (1968,9,2860)
- [100] KOMAR (A.P), KOROBOCHKO (Yu.S), GRACHEV (B.D) et MINEEV (V.I)  
Fiz. Tverd. Tela 1968,10,1547 (1968,10,1222)
- [101] SHUL'MAN (A.R), KORABLEV (V.V) et MOROSOV (Yu. A)  
Fiz. Tverd. Tela 1968,10,1570 (1968,10,1246)
- [102] STERN (R.M) et TAUB (H)  
Phys. Rev. Letters 1968,20,1340

- [103] STERN (R.M), TAUB (H) et GERVAIS (A)  
4th. International Materials Symposium  
Univ. of California, Berkeley, Juin 1968
- [104] BRONSHTEJN (I.M) et DOLININ (V.A)  
Radiotekh. i Elektr. 1968,13,179 (1968,13,153)
- [105] BRONSHTEJN (I.M) et SEGAL (R.B)  
Fiz. Tverd. Tela 1960,2,93 (1960,2,84)
- [106] BRONSHTEJN (I.M) et SEGAL (R.B)  
Radiotekh. i Elektr. 1960,5,1741 (1960,5,293)
- [107] STERNGLASS (E.J)  
Phys. Rev. 1954,95,345
- [108] BETHE (H.A)  
Ann. d. Phys. Lpz. 1940,5,325
- [109] EVERHART (T.E)  
J. Appl. Phys. 1960,31,1483
- [110] ARCHARD (G.D)  
J. Appl. Phys. 1961,32,1505
- [111] BODY (Z.T)  
Brit. J. Appl. Phys. 1962,13,483
- [112] DASHEN (R.F)  
Phys. Rev. 1964,134, A 1025
- [113] TERRILL (H)  
Phys. Rev. 1923,22,101
- [114] KANTER (H)  
Brit. J. Appl. Phys. 1964,15,555
- [115] BOTHE (W)  
Ann. d. Phys. Lpz. 1949,6,44
- [116] HARROWER (G.A)  
Phys. Rev. 1956,102,340
- [117] SHUL'MAN (A.R) ZAKIROVA (I.R) MOROZOV (Yu.A) FRIDRIKHOV (S.A)  
J. Tekh. Fiz. 1958,28,87 (1958,3,79)
- [118] BOLSHOV (V.G) et PANCHEKO (O.A)  
P.T.E 1961,6,108~
- [119] ZINKE (O.H)  
Phys. Rev. 1957,106,1163
- [120] BRONSHTEJN (I.M) et KOVALENKO (V.S)  
Fiz. Tverd. Tela 1962,4,2047 (1963,4,1501)
- [121] BRONSHTEJN (I.M) et DENISOV (S.S)  
Fiz. Tverd. Tela 1965,7,2252 (1966,7,1819)

- [I22] SHEIBNER (E.J) et THARP (L.N)  
Surface Science 1967,8,247
- [I23] BRONSHTEJN (I.M) et SHCHUCHINSKIJ (Ia,M)  
Radiotekh. i Elektr. 1963,2,904 (1964,2,738)
- [I24] HÖLZL (J)  
Solid State Comm. 1964,2,183
- [I25] HÖLZL (J)  
Solid State Comm. 1964,2,187
- [I26] HÖLZL (J)  
Zeitsch. F. Phys. 1965,184,50
- [I27] SHERMAN (Ch. H) et GORDON (N.E)  
Air Force Cambridge Research Lab. Office of Aerospace Air  
Force, Bedford, Mass. USA  
Rep. n° 67-0651
- [I28] HÖLZL (J)  
3th. Conf. on Electronics and Vacuum Phys. Transactions  
Prague 1965  
Prague Academia 1967, p 411
- [I29] KOLLATH (R)  
Ann. d. Phys. Lpz. 1941,39,59
- [I30] LANDER (J.J)  
Phys. Rev. 1953,91,1382
- [I31] HARRIS (L.A)  
Industrial Research February 1968, p 54
- [I32] HARRIS (L.A)  
J. Appl. Phys. 1968,39,1419
- [I33] HARRIS (L.A)  
J. Appl. Phys. 1968,39,1428
- [I34] NAKHODKIN (N.G) MELNIK (P.V)  
Fiz. Tverd. Tela 1963,5,2441 (1964,5,1779)
- [I35] FARNSWORTH -(H.E)  
Phys. Rev. 1925, 25,41
- [I36] JONKER (J.L.H)  
Philips Research Rep. 1951, 6,372
- [I37] JONKER (J.L.H)  
Philips Research Rep. 1953,8,434

- [138] JONKER (J.L.H)  
Philips Research Rep. 1957,12,249
- [139] BURNS (J)  
Phys. Rev. 1960,119,102
- [140] APPELT (G)  
Physica Status Solidi 1968,27,657
- [141] BRONSHTEJN (I.M) et DOLININ (V.A)  
Radiotekh. i Elektr. 1968,13,181 (1968,13,155)
- [142] FAGOT (B) et FERT (C)  
Cr Acad. Sci. Paris 1964,258,1180
- [143] FAGOT (B) COLOMBIE (N), THIRY (R) et FERT (C)  
CR. Acad. Sci. Paris 1966,262,173
- [144] BRONSHTEJN (I.M) et SHCHUCHINSKIJ (Ia.M)  
Radiotekh. i Elektr. 1960,5,1650 (1960,5,142)
- [145] JASNOPOLSKIJ (N.L) et TJAGUNOV (G.A)  
J. Tekh. Fiz. 1939,2,1573
- [146] KADYSHEVICH (A.E)  
J. Eksp. Theor. Fiz. 1945,15,600
- [147] GRACHEV (B.D) KOMAR (A.P) KOROBCHKO (Yu.S) et MINEEV (V.I)  
Fiz. Tverd. Tela 1968,10,2408 (1969,10,1894)
- [148] BAROODY (E.M)  
Phys. Rev. 1950,78,750
- [149] JONKER (J.L.H)  
Philips Research Rep. 1952,7,1
- [150] BARUT (A.O)  
Phys. Rev. 1954,93,981
- [151] RODDA (S)  
Nature 1955,175,1112
- [152] LYE (R.G) et DEKKER (A.J)  
Phys. Rev. 1957,107,977
- [153] AGARWAL (B.P)  
Proc Phys.Soc 1958,71,851
- [154] MALAT (V)  
Czech. J. Phys. 1962, B 12,720

- [155] DESQUANT (M), TOUZILLIER (L), GELARD (J) et COUCHET (G)  
CR Acad. Sci. Paris 1966,263,993
- [156] CAILLER (M)  
CR Acad. Sci. Paris 1962,254,3502
- [157] VIATSKIN (A.Ia) et MAKHOV (A.F)  
J. Tekh. Fiz. 1958,28,740 (1958,3,690)
- [158] VIATSKIN (A.Ia) et MAKHOV (A.F)  
Fiz. Tverd. Tela 1960,2,887 (1960,2,810)
- [159] MAKHOV (A.F)  
Fiz. Tverd. Tela 1960,2,2161 (1960,2,1934)
- [160] MAKHOV (A.F)  
Fiz. Tverd. Tela 1960,2,1942 (1960,2,1942)
- [161] MAKHOV (A.F)  
Fiz. Tverd. Tela 1960,2,2176 (1960,2,1945)
- [162] VIATSKIN (A.Ia) et PILIANKEVICH (A.N)  
Fiz. Tverd. Tela 1962,4,1038 (1962,4,765)
- [163] VIATSKIN (A.Ia) et PILIANKEVICH (A.N)  
Fiz. Tverd. Tela 1963,5,2285 (1964,5,1662)
- [164] VIATSKIN (A.Ia) et PILIANKEVICH (A.N)  
Fiz. Tverd. Tela 1964,6,1563 (1964,6,1230)
- [165] RAVIN(V.S)  
Fiz. Tverd. Tela 1965,7,3430 (1965,7,2767)
- [166] SMIRNOV (L.A) et RUMSH (M.A)  
Fiz. Tverd. Tela 1967,9,3361 (1968,9,2653)
- [167] YOUNG (J.R)  
J. Appl. Phys. 1957,28,524
- [168] GRADSHTEYN (I.S) et RYZHIK (I.M)  
Table of Integrals, Series and Products  
Acad. Press 1965
- [169] WOLFF (P.A)  
Phys. Rev. 1954,95,56
- [170] PUFF (H)  
Physica Status Solidi 1964,4,125
- [171] PUFF (H)  
Physica Status Solidi 1964,4,365

- [172] PUFF (H)  
Physica Status Solidi 1964,4,569
- [173] MORSE (P.M) et FESHBACH (H)  
Methods of Theoretical Physics  
Mc. Graw Hill 1953
- [174] LINDHARD (J)  
Kgl. Danske Videnskabsn Selskab. Mat-fys.Medd. 1954,28,8
- [175] STREITWOLF (H.W)  
Monatsb. Deutsch Akad.Wissensch. Berlin 1959,I,20
- [176] STREITWOLF (H.W)  
Ann. d. Phys. 1959,3,183
- [177] STOLZ (H) et STREITWOLF (H.W)  
Zeitsch. f. Physik 1958,13a,1100
- [178] STOLZ (H)  
Ann. d. Phys. 1959,3,197
- [179] PUFF (H)  
Physica Status Solidi 1962,2,1699
- [180] PUFF (H)  
Monatsb. Deutsch Akad. Wissensch. Berlin 1963,5,183
- [181] SCHIFF(L.I)  
Quantum Mechanics  
Mc. Graw Hill 1955
- [182] WHITTAKER (E.T) et WATSON (G.N)  
Modern Analysis  
Cambridge University Press, 1965
- [183] DU BOIS (D.F)  
Ann. Phys. N. Y. 1959,7,174
- [184] DU BOIS (D.F)  
Ann. Phys. N. Y. 1959,8,24
- [185] NINHAM (B.W), POWELL (C.J) et SWANSON (N)  
Phys. Rev. 1966, 145, 209
- [186] FERRELL (R.A)  
Phys. Rev. 1957,107,450
- [187] WATANABE (H)  
J. Phys. Soc. Japan 1956,II,112

- [188] KANE (E.O)  
Phys. Rev. 1967,159,624
- [189] MELNGAILIS (J)  
Thèse, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh  
Pennsylvania 1965
- [190] CAILLER (M) et OFFRET (S)  
J. Phys. 1967,28,451
- [191] BUTCHER (P.N)  
Proc. Phys. Soc. 1951,A 64,765
- [192] BASSANI (F)  
dans : The Optical Properties of Solids. Intern. School  
of Physics (E. Fermi) cours n° 34  
Acad. Press 1966
- [193] SOKOLOV (A.V)  
Optical Properties of Metals  
Blackie, 1967
- [194] BEAGLEHOLE (D)  
Proc. Phys. Soc. 1965, 85,1007
- [195] BEAGLEHOLE (D)  
Proc. Phys. Soc. 1966,87,461
- [196] MOTT (N.F) et JONES (H)  
The Theory of the properties of metals and alloys  
Dover 1936
- [197] FRIEDEL (J)  
Proc. Phys. Soc 1952,65 B,769
- [198] HAGA (E) et OKAMOTO (H)  
J. Phys. Soc. 1965,20,1610
- [199] HAGA (E)  
J. Phys. Soc. Japan 1966,21,1508
- [200] BURDICK (G.A)  
Phys. Rev. 1963,129,138
- [201] GOLDBERGER (M.L)  
Phys. Rev. 1948,74,1269
- [202] ROBIN (S)  
dans : Optical Properties and electronic Structure of  
Metals and Alloys ABELES Editor  
North Holland Co 1966, p.202

- [203] SLATER (J.C)  
Quantum Theory of molecules and Solids Vol. 2, p.283  
ed. Acad. Press 1965
- [204] SEGALL (B)  
Report n° 6I RL (2785 G) General Electric Research Lab.  
July 1961
- [205] LEWIS (P.E) et LEE (P.M)  
Phys. Rev 1968, 175, 795
- [206] BERGLUND (C.N) et SPICER (W.E)  
Phys. Rev. 1964, 136, A 1030
- [207] BERGLUND (C.N) Et SPICER (W.E)  
Phys. Rev. 1964, 136, A 1044
- [208] BAROODY (E.M)  
Phys. Rev. 1956, 101, 1679
- [209] FRÖHLICH (H)  
Proc. Phys. Soc. London 1955, B 68, 657
- [210] BLODGETT (A.J) et SPICER (W.E)  
Phys. Rev. Letters 1965, 15, 29
- [211] BLODGETT (A.J) et SPICER (W.E)  
Phys. Rev. 1966, 146, 390
- [212] SPICER (W.E)  
Phys. Letters 1966, 20, 325
- [213] BLODGETT (A.J) et SPICER (W.E)  
Phys. Rev. 1967, 158, 514
- [214] PHILIPP (H.R) et EHRENREICH (H)  
Phys. Rev. 1963, 129, 1550
- [215] SPICER (W.E) et EDEN (R.C)  
Bull. Am. Phys. Soc. 1965, 10, 1198
- [216] SPICER (W.E)  
Phys. Rev. 1967, 154, 385
- [217] EASTMAN (D.E) et KROLIKOWSKI (W.F)  
Phys. Rev. Letters 1968, 21, 623
- [218] PHILLIPPS (J.C)  
Phys. Rev. 1965, 140, A 1254
- [219] MUELLER (F.M)  
Phys. Rev. 1967, 153, 659

BIBLIOGRAPHIE DE L'APPENDICE

- [A 1] FEYNMAN (R.P)  
Phys. Rev. 1949,76,749
- [A 2] FEYNMAN (R.P)  
Phys. Rev. 1949,76,769
- [A 3] ADLER (S.L)  
Phys. Rev. 1963,130,1654
- [A 4] ADLER (S.L)  
Phys. Rev. 1962,126,413
- [A 5] QUINN (J.J) et FERRELL (R.A)  
Phys. Rev. 1958,112,812
- [A 6] ENGELSBERG (S)  
Phys. Rev. 1961,123,1130
- [A 7] KANE (E.O)  
Phys. Renv. 1967,159,624
- [A 8] QUINN (J.J)  
Phys. Rev. 1962,126,1453
- [A 9] FERRELL (R.A)  
Phys. Rev. 1956,101,554
- [A10] RAETHER (H)  
Springer Tracts in Modern Physics 1965 Vol. 38
- [A11] PINES (D) et NOZIERES (P)  
The Theory of Quantum Liquids  
ed. Benjamin 1966
- [A12] RITCHIE (R.H) et ASHLEY (J.C)  
J. Phys. Chem. Solids 1965,26,1689

## BIBLIOGRAPHIE

-:-:-

Dans la bibliographie nous avons donné, entre parenthèses, les références de la traduction Américaine des articles Russes. La correspondance des titres des revues est la suivante :

|                      |                                                                  |
|----------------------|------------------------------------------------------------------|
| J.Tekh. Fiz.         | Soviet Physics. Journal of Technical Physics.                    |
| J.Eksp. Theor. Fiz.  | Soviet Physics. Journal of experimental and theoretical Physics. |
| Fiz. Tverd. Tela     | Soviet Physics. Solid State.                                     |
| Doklady Akad. Nauk   | Soviet Physics. Doklady                                          |
| Radiotekh. i Elektr. | Radioengineering and Electronics.                                |





